Biblioteca Digital
F C E N - U B A

BIBLIOTECA CENTRAL LUIS F LELOIR
BIBLIOTECA CENTRAL LELOIR
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UBA

Tesis de Grado

Dispersión electromagnética y plasmones superficiales en partículas esféricas núcleo-recubrimiento (core-shell) con capas de grafeno

Gingins, Marcelo J.

2017

Este documento forma parte de las colecciones digitales de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en bibliotecadigital.exactas.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the digital collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in bibliotecadigital.exactas.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:
Gingins, Marcelo J.. (2017). Dispersión electromagnética y plasmones superficiales en partículas esféricas núcleo-recubrimiento (core-shell) con capas de grafeno. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.
https://hdl.handle.net/20.500.12110/seminario_nFIS000017_Gingins

Cita tipo Chicago:
Gingins, Marcelo J.. "Dispersión electromagnética y plasmones superficiales en partículas esféricas núcleo-recubrimiento (core-shell) con capas de grafeno". Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 2017.
https://hdl.handle.net/20.500.12110/seminario_nFIS000017_Gingins

EXACTAS UBA
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

UBA
Universidad de Buenos Aires

Dirección: Biblioteca Central Dr. Luis F. Leloir, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. Intendente Güiraldes 2160 - C1428EGA - Tel. (++54 +11) 4789-9293

Contacto: bibliotecadigital.exactas.uba.ar

Dispersión electromagnética y plasmones superficiales en partículas esféricas núcleo-recubrimiento (core-shell) con capas de grafeno.

Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Buenos Aires

Marcelo J. Gingins

29 de diciembre de 2016

TEMA: Dispersión electromagnética y plasmones superficiales en partículas esféricas núcleo-recubrimiento (core-shell) con capas de grafeno.

ALUMNO: LU N° :559/93

LUGAR DE TRABAJO: Departamento de Física FCEN.

DIRECTOR DEL TRABAJO: Dr. Ricardo Depine

CODIRECTOR o COLABORADOR:

FECHA DE INICIACION:

FECHA DE FINALIZACION:

FECHA DE EXAMEN:

INFORME FINAL APROBADO POR:

Autor	Jurado
Director	Jurado
Profesor de Tesis de Licenciatura	Jurado

Índice general

Resumen **v**

1. Introducción **1**
1.1. Motivación 1
1.2. Propiedades constitutivas del grafeno 3
1.3. Plasmónica y grafeno 6
1.4. Desarrollo de este trabajo 8

2. Desarrollo Teórico **11**
2.1. Ecuaciones de Maxwell 11
2.2. Soluciones de las ecuaciones de los campos en coordenadas esféricas 14
2.3. Desarrollo de los campos 19
2.4. Desarrollo de una onda plana en armónicos esféricos vectoriales 21
2.5. Condiciones de Contorno en las Interfases 24
2.5.1. Condiciones de contorno en la capa esférica interior $r = R_1$ 27
2.5.2. Condiciones de contorno en la capa esférica exterior $r = R_2$ 31
2.6. Coeficientes de Transmisión 33
2.6.1. Modo transverso magnético 33
2.6.2. Modo transverso eléctrico 35
2.7. Flujo de Energía 36
2.7.1. Energía disipada en las capas de grafeno 39

3. Herramienta numérica **41**
3.1. Verificación del funcionamiento del código 41

4. Resultados **49**
4.1. Resultados utilizando una capa esférica 49
4.2. Resultados utilizando dos capas esféricas concéntricas 54
4.3. Estudio de los campos cercanos 57

5. Conclusiones **65**

Resumen

En el presente trabajo se estudia la dispersión de ondas electromagnéticas por dos superficies esféricas de grafeno concéntricas utilizando un desarrollo basado en las soluciones de Mie [Mie08]. Se realizaron cálculos para las secciones eficaces de dispersión y extinción para frecuencias de incidencia en el rango de los Terahertz donde el grafeno soporta plasmones superficiales que se manifiestan como intensificaciones en los espectros de estas secciones eficaces. Los datos se verificaron con resultados disponibles en la literatura y se analizaron nuevas configuraciones que incluyeron la combinación con materiales dieléctricos y metálicos.

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

El grafeno es un alótropo del carbono en forma de una red cristalina hexagonal de un átomo de espesor. Se lo puede considerar como un material bidimensional, especialmente para frecuencias en el orden de los Terahertz, donde la longitud de onda en el vacío es del orden de 10^7 nm, mientras que las dimensiones atómicas son del orden del Å, esto es 10^{-1} nm. El premio Nobel de física del año 2010 fue otorgado a Andre Geim y Konstantin Novoselov por el descrubrimiento del grafeno (año 2004) y su posterior caracterización.
Hasta el momento de su descubrimiento la existencia de láminas de carbono de pocos átomos de espesor y estables a temperatura ambiente no se creía posible. Los antecedentes conocidos eran los fullerenos, estos consisten en superficies de carbono cerradas o semicerradas de un átomo de espesor, de forma esférica o cilíndrica. El primero de ellos, descubierto en 1985, es llamado Buckminsterfullerene y consiste en una superficie icosaédrica de carbono de un átomo de espesor compuesta por unos 60 átomos [HWKS85] y por cuyo descubrimiento recibieron el Premio Nobel de química en 1996 Harold W. Kroto, Robert F. Curl y Richard E. Smalley [Rea96]. Luego se han conseguido estructuras esferoides de 70, 76, 78 y 84 átomos de carbono. En 1993 Sumio Iijima descubrió los nanotubos de carbono [ST93]. Estos nanotubos también pertenecen a la familia de los fullerenos, en este caso se trata de estructuras de un átomo de espesor con forma de cilindros (Figura 1.1). Debido a que estas estructuras contienen pocos átomos (del orden de 100), el estudio de su respuesta óptica no

admite un tratamiento macroscópico. En cambio, el grafeno en las frecuencias consideradas en este trabajo, se puede tratar de manera macroscópica a través de parámetros constitutivos a determinar en forma experimental o teórica.

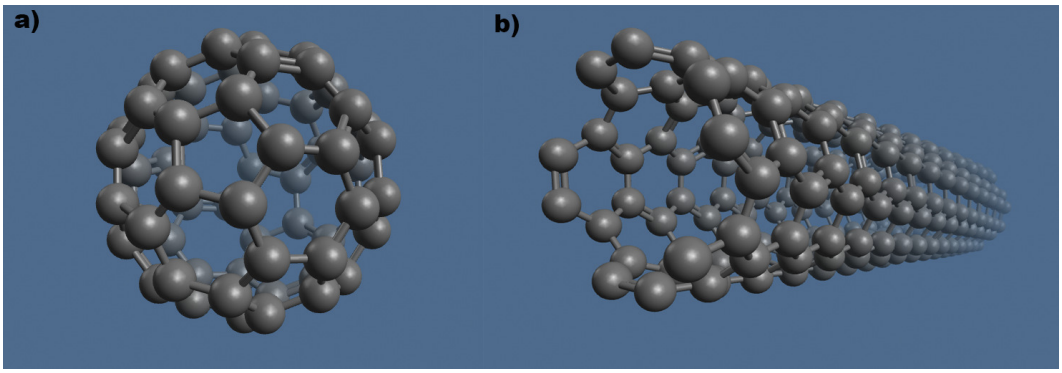

Figura 1.1: Fullerenos: a) Buckminsterfullerene b) nanotubo de carbono

Algunas de las propiedades que hacen del grafeno un material interesante desde el punto de vista tecnológico y teórico son su transparencia (tiene una transmisividad cercana a la unidad) y su conductividad. La conductividad del grafeno se puede controlar a través de un campo eléctrico transversal. El mecanismo, llamado Efecto de Campo Eléctrico, también está presente en los metales, aunque debido al apantallamiento (en distancias del orden de 1 nm), el efecto sobre la densidad de portadores queda minimizado por las cargas en volumen y el cambio en la densidad de portadores resulta menor que el 1 %, aún para láminas de muy pequeño espesor [KGN04]. El Efecto de Campo Eléctrico se puede conseguir en grafeno dispuesto sobre un sustrato dieléctrico mediante una diferencia de potencial entre ellos llamado Potencial de Compuerta (Gate Voltage). Se ha observado experimentalmente que de esta manera se consigue una densidad de portadores que varía en forma lineal con la diferencia de potencial aplicada [KGN05]. Esto hace que la conductividad del grafeno pueda ser ajustada mediante la aplicación de una diferencia de potencial (Figura 1.2).
Estas propiedades han generado en los últimos años una carrera en el estudio teórico y de las posiblidades tecnológicas del grafeno [Dep16].

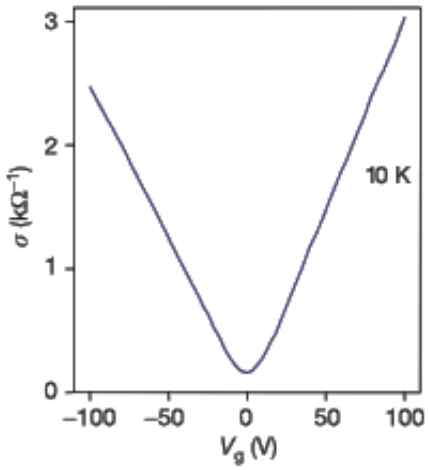

Figura 1.2: Conductividad del grafeno en función de la diferencia de potencial aplicada (Gate Voltage) para grafeno sobre SiO_2, tomado de [KGN05]

1.2. Propiedades constitutivas del grafeno

Los átomos de carbono en el grafeno se disponen formando hexágonos regulares. Este tipo de red, llamado panal de abeja, no constituye en sí mismo una red de Bravais, pero puede describirse mediante una red de Bravais triangular con una base [AM76]. Para describir la red triangular, se pueden escoger por ejemplo los vectores $\vec{a_1} = a(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$ y $\vec{a_2} = a(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$, en este caso el parámetro de red a es 1,44 Å [FV06], y un vector que representa el segundo átomo de la base, $\vec{b} = a(0, \frac{1}{\sqrt{3}})$. (Figura 1.3)

La red recíproca es una red hexagonal, rotada en 30° con respecto a la red directa. Los vectores que generan la red recíproca se pueden escribir $\vec{b_1} = \frac{2\pi}{a}(1, \frac{1}{\sqrt{3}})$ y $\vec{b_2} = \frac{2\pi}{a}(1, -\frac{1}{\sqrt{3}})$, resulta conveniente escribir además los vectores que unen un átomo de la red con sus tres primeros vecinos, estos vienen dados por $\vec{c_1} = a(0, \frac{1}{\sqrt{3}})$, $\vec{c_2} = a(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}})$ y $\vec{c_3} = a(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}})$. Utilizando un esquema de cálculo de Tight-Binding [AM76], se llega, para las energías de las bandas electrónicas a [FV06]:

$$\epsilon_{1,2}(\vec{k}) = \pm\gamma\sqrt{1 + 4cos(3k_x a/2)cos(k_y a\sqrt{3}/2) + 4cos^2(k_y a\sqrt{3}/2)} \tag{1.1}$$

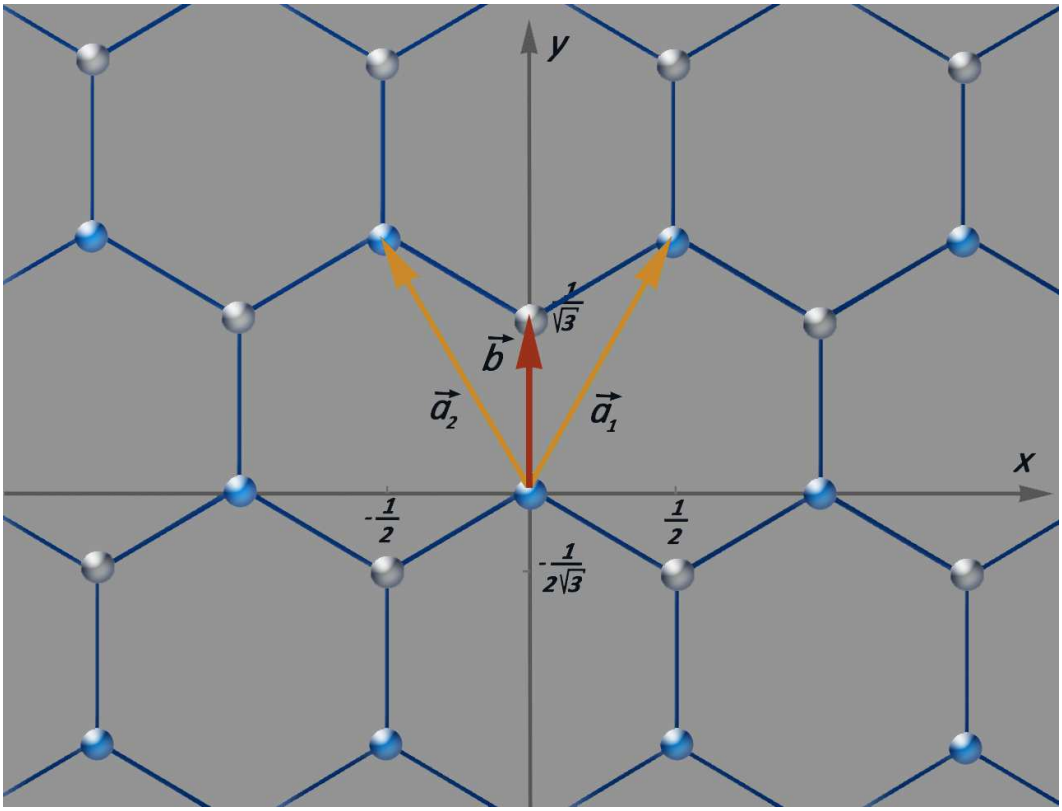

Figura 1.3: Red de grafeno formada por átomos de carbono con los vectores de la red $\vec{a}_1$ y $\vec{a}_2$ y el vector de la base $\vec{b}$

donde $\gamma \approx 3\,\text{eV}$.

La primera zona de Brillouin representa también un hexágono en la red recíproca, en la figura 1.4 se pueden ver las bandas de energía sobre esta zona, donde se destacan los puntos K en los cuales las bandas de valencia y de conducción forman conos que se tocan en sus vértices. Debido a esto, el grafeno puede ser considerado un semiconductor con banda prohibida nula.

En los puntos K de la primera zona de Brillouin, donde la energía es cero, se puede hacer un desarrollo para vectores de onda cercanos, considerando en la red recíproca un vector $\vec{k} = \vec{K} + \vec{q}$, donde $|\vec{q}|$ es pequeño. El hamiltoniano en términos de $\vec{q}$ resulta en una relación de dispersión lineal para pequeños desplazamientos de los puntos K.

$$\epsilon_{1,2}(\vec{q}) = \pm\frac{3}{2}\gamma a|\vec{q}| \tag{1.2}$$

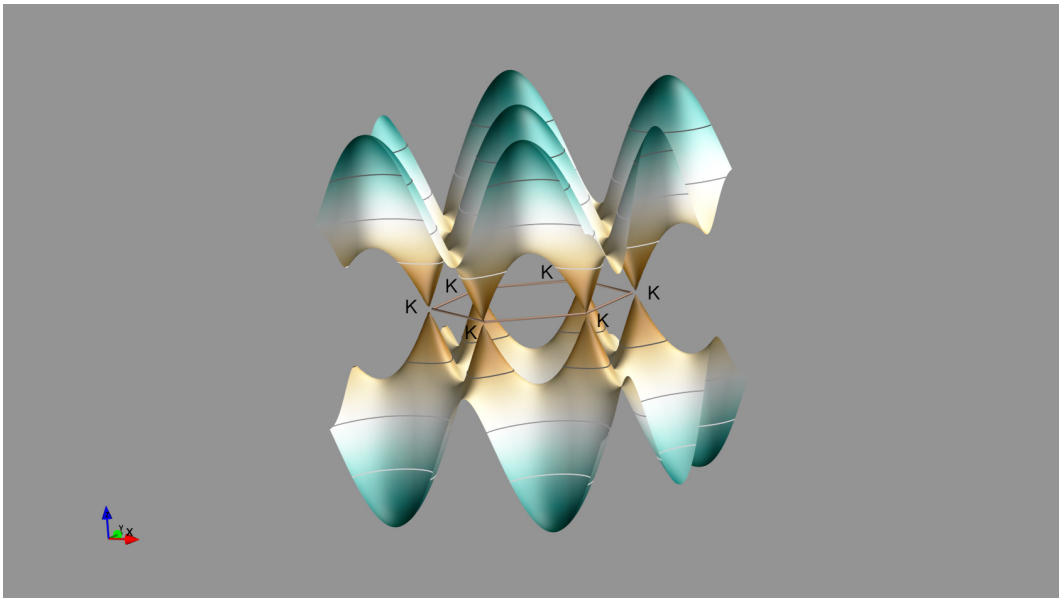

Figura 1.4: Bandas de energía del grafeno, el hexágono representa la primera zona de Brillouin donde se pueden ver los puntos K, en estos puntos se tocan las bandas de valencia y de conducción

Esta relación de dispersión lineal en el vector de onda $\vec{q}$ posee la forma funcional de la dispersión de fermiones sin masa con una velocidad $v = 3\gamma a/2 \approx 10^8\,{}^{\mathrm{cm}}/_{\mathrm{s}}$ en lugar de la velocidad de la luz.

Para frecuencias altas, mucho mayores que kv, la conductividad del grafeno viene dada por la siguiente expresión conocida como Fórmula de Kubo [Fal08]:

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2\omega}{i\pi\hbar}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\epsilon|}{(\hbar\omega)^2}\frac{df_0(\epsilon)}{d\epsilon}d\epsilon - \int_0^{+\infty} \frac{f_0(-\epsilon) - f_0(\epsilon)}{\hbar^2(\omega + i\delta)^2 - 4\epsilon^2}d\epsilon\right] \tag{1.3}$$

donde $f_0(\epsilon)$ es la función de distribución de Fermi:

$$f_0(\epsilon) = \frac{1}{\exp\left[(\epsilon - \hbar\mu)/K_BT\right] + 1} \tag{1.4}$$

en esta última expresión, μ se refiere al potencial químico y T a la temperatura absoluta.

La primera integral en (1.3) representa la conductividad debida a las transiciones dentro

de una misma banda de energía o intrabanda, integrando se obtiene:

$$\sigma^{intra} = \frac{2i}{\pi} K_B T \frac{ln[2cosh(\frac{\hbar\mu}{2K_B T})]}{\hbar\omega + i\hbar\gamma} \tag{1.5}$$

en la que γ representa la frecuencia de colisiones de los electrones con impurezas en la superficie y K_B a la constante de Boltzmann.
La segunda integral en (1.3) representa la conductividad debida a las transiciones entre bandas o interbanda [Fal08]

$$\sigma^{inter}(\omega) = \frac{1}{4}\left\{\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} arctan\left(\frac{\hbar\omega - 2\hbar\mu}{2K_B T}\right) - \frac{i}{2\pi} ln\left[\frac{(\hbar\omega + 2\hbar\mu)^2}{(\hbar\omega - 2\hbar\mu)^2 + (2K_B T)^2}\right]\right\} \tag{1.6}$$

La conductividad del grafeno es la suma de ambas contribuciones:

$$\sigma(\omega) = c\,\alpha\,[\sigma^{intra}(\omega) + \sigma^{inter}(\omega)] \tag{1.7}$$

donde c es la velocidad de la luz en el vacío y aparece la constante de estructura fina $\alpha \simeq \frac{1}{137}$.
A bajas temperaturas, el término intrabanda (1.5) domina la conductividad como puede verse en la figura 1.5.

A muy bajas temperaturas, el factor $ln[2cosh(\frac{\hbar\mu_c}{2K_B T})]$ se puede aproximar por $\frac{\hbar\mu_c}{2K_B T}$, en ese caso, el término intrabanda que domina la conductividad del grafeno en estas condiciones resulta:

$$\sigma_{intra} = \frac{1}{\pi}\frac{\hbar^2\mu_c\gamma_c}{(\hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma_c)^2} + \frac{i}{\pi}\frac{\hbar^2\omega\mu_c}{(\hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma_c)^2} \tag{1.8}$$

que tiene la forma de la conductividad clásica derivada del modelo de Drude.

1.3. Plasmónica y grafeno

Los plasmones superficiales son ondas en la densidad de carga, al igual que en otros fenómenos ondulatorios, estas se pueden presentar como ondas propagantes, en cuyo caso se habla de plasmones propagantes o como ondas estacionarias, en cuyo caso hablamos de plasmones localizados.

Los plasmones propagantes aparecen como modos a lo largo de guías de ondas y en nanotubos o estructuras cilíndricas y se pueden propagar a lo largo del eje o en espirales

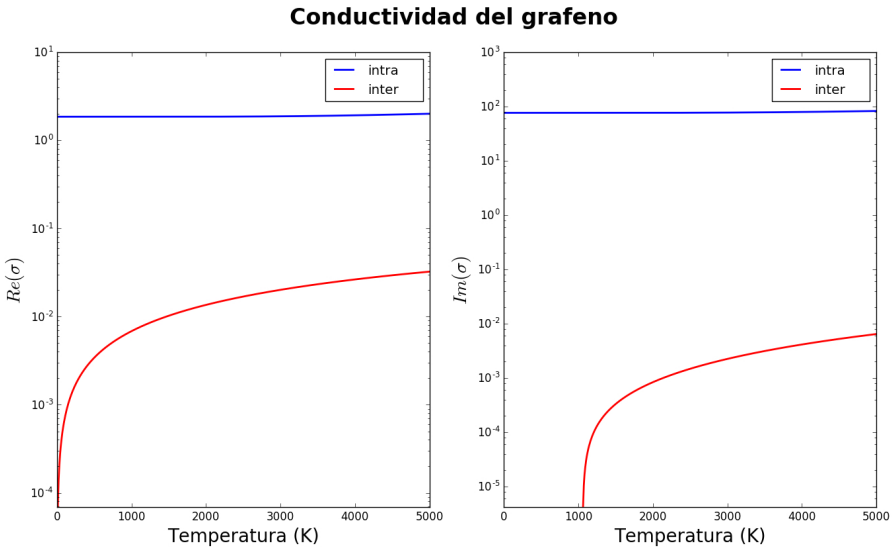

Figura 1.5: Contribución de los términos inter e intrabanda a la conductividad del grafeno en función de la temperatura para una frecuencia fija de 1 THz, con un potencial químico $\hbar\mu_c = 1{,}0\,\text{eV}$ y frecuencia de colisiones $\hbar\gamma_c = 0{,}0001\,\text{eV}$. Como se puede ver, en estos rangos de temperatura, tanto la parte real como la imaginaria de la conductividad del grafeno son dominadas por la conductividad intrabanda.

alrededor de la superficie cilíndrica. En los últimos años se han estudiado este tipo de plasmones es nanotubos metálicos [SR08] y en cilindros recubiertos con grafeno [YGJ14a, YGJ14b]. Estos plasmones propagantes, a diferencia de los plasmones localizados, tienen un espectro de frecuencias continuo.

Los plasmones localizados, al igual que las ondas estacionarias en muchos sistemas ondulatorios, tienen un espectro de frecuencias discreto [WLK15, Mai07]. En estructuras cilíndricas y nanotubos, se pueden excitar ambos tipos de plasmones, propagantes y localizados, dependiendo de la dirección de incidencia y la frecuencia [MARD15, MCD16].

Uno de los desafíos actuales de la óptica es controlar la luz en volúmenes de dimensiones mucho menores que la longitud de onda al cubo. La plasmónica, que ya ha jugado un papel muy importante en la construcción de metamateriales y en el desarrollo de sus aplicaciones, se presenta como unos de los caminos más prometedores para tal fin. Los metales nobles como la plata o el oro han sido hasta el momento los materiales plasmónicos más usados en numerosas aplicaciones. Sin embargo, debido a la imposibilidad de controlar la densidad electrónica de los metales nobles, los plasmones metálicos tienen aplicación en un rango

acotado del espectro electromagnético. Por ejemplo, no tienen aplicación en la zona de los terahertz, donde se esperan novedosas aplicaciones [Sak05] en áreas como medicina, seguridad o astronomía submilimétrica. La posibilidad de generalizar al rango de los terahertz muchos dispositivos basados en la excitación de plasmones superficiales, actualmente en uso en el rango visible o infrarojo, ha despertado el interés por el estudio de los plasmones superficiales existentes en una lámina de grafeno [MJB13].

La estructura electrónica de la capa monoatómica de grafeno tiene zonas donde la relación de dispersión es lineal y el gap entre la banda de valencia y la de conducción es nulo [KGN05, ZQLB08, Fal08]. La densidad de carga del grafeno (y en consecuencia también sus propiedades ópticas [XLN13, dA14]) pueden modularse mediante dopaje químico [HLZ11] o mediante la aplicación de un campo estático como se mencionó al comienzo de la sección [CFCW11, FWS08]. Por estos motivos, el grafeno parece ser un material especialmente adecuado para manipular la luz eléctricamente, tal como sucede en numerosas aplicaciones donde la excitación de plasmones superficiales juega un rol fundamental [YVBP10, WGX13].

Estudios recientes [MJS09] han mostrado que si se bloquean las transiciones interbanda, los plasmones de una hoja plana de grafeno pueden estar muy confinados y a la vez propagarse con muy baja pérdida. El bloqueo de las transiciones interbanda puede lograrse empujando el umbral de estas transiciones a frecuencias mucho mayores que la frecuencia de trabajo, por ejemplo aumentando el nivel de dopaje.

1.4. Desarrollo de este trabajo

En este trabajo estudiamos plasmones localizados en partículas esféricas con un núcleo metálico o dieléctrico con distintas configuraciones de recubrimiento que involucran una o dos capas de grafeno y una corteza dieléctrica. Partiendo de un desarrollo basado en la soluciones de Mie se establecen las condiciones de contorno que deben cumplir los campos eléctrico y magnético en las distintas interfases. Estas condiciones vinculan a los campos en las diferentes regiones del espacio y permiten calcular los coeficientes de transmisión (capítulo 2). Estos coeficientes de transmisión relacionan a la onda incidente con el campo dispersado y a partir de ellos se derivan diferentes cantidades de interés como las secciones eficaces o eficiencias de dispersión, absorción y extinción. Se desarrolla un programa de computadora para calcular numericamente estas cantidades, se verifica la convergencia de

los cálculos y el correcto funcionamiento (capítulo 3). Finalmente se hallan cantidades como las secciones eficaces variando distintos parámetros y se obtienen distribuciones de campos cercanos utilizando configuraciones que no han sido estudiadas con anterioridad (capítulo 4) y se extraen conclusiones de lo realizado (capítulo 5).

Capítulo 2

Desarrollo Teórico

Damos un resumen de las ecuaciones de Maxwell, que gobiernan el electromagnetismo macroscópico en medios lineales, isótropos y homogéneos. La superficie de grafeno será tratada como una hoja de corriente a la que caracterizaremos por una conductividad superficial $\sigma(\omega)$, que tiene contribuciones intrabanda e interbanda, según el modelo de Kubo que ya fue explicado en el capitulo anterior (1.5), (1.6), (1.7). Luego usaremos las ecuaciones de Maxwell y las condiciones de contorno para analizar partculas del tipo ncleo-recubrimiento (core-shell) en las que aparecen capas esféricas de grafeno entre diferentes materiales, dieléctricos y metálicos. Las partículas estudiadas se esquematizan en la figura 2.1 donde ε_1, ε_2 y ε_3 representan las permitividades dieléctricas en las zonas $r < R_1$, $R_1 < r < R_2$ y $r > R_2$ respectivamente en las que se divide el espacio y R_1 y R_2 representan los radios de las capas de grafeno. La onda incidente es una onda plana cuyo vector de onda apunta en la dirección $\hat{z}$ positiva y el campo eléctrico tiene polarización lineal en la dirección $\hat{x}$.

2.1. Ecuaciones de Maxwell

Se parte de las ecuaciones de Maxwell en el sistema gaussiano:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho \tag{2.1}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \tag{2.2}$$

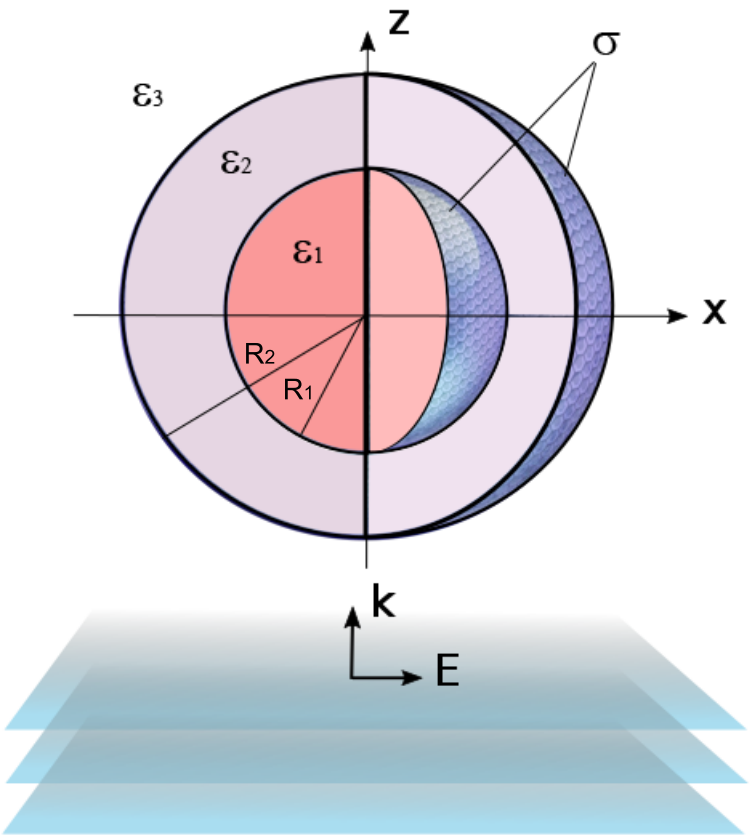

Figura 2.1: Configuración estudiada. En la figura se pueden distinguir tres regiones del espacio. Cada una de estas regiones es homogénea y posée una permitividad eléctrica propia, estas son ε_1, ε_2 y ε_3. Dividiendo el espacio en las tres regiones se encuentran las capas esféricas de grafeno de radios R_1 y R_2 que poseén ambas las mismas propiedades, descriptas por una conductividad superficial σ.

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{J} + \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \tag{2.3}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \tag{2.4}$$

con

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \tag{2.5}$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \tag{2.6}$$

y

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} \tag{2.7}$$

donde se considera un medio isótropo y homogéneo, esto es, tanto ε como μ son escalares que, dentro de un mismo medio, no dependen de la posición. De aquí en más ϵ_j se referirá a la permitividad del medio j. Lo mismo para las permeabilidades μ_j

Si los campos tienen una dependencia temporal armónica, del tipo $\exp(-i\omega t)$, entonces las ecuaciones (2.1), (2.2), (2.3) y (2.4) pueden escribirse:

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0 \tag{2.8}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \tag{2.9}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c}\,\sigma \mathbf{E} - i\,\frac{\omega \varepsilon}{c}\mathbf{E} \tag{2.10}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\,\frac{\omega \mu}{c}\,\mathbf{H} \tag{2.11}$$

en las que ahora $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ pueden ser vectores complejos y no contienen ya la dependencia temporal, se dice que el conjunto de ecuaciones anterior representa las ecuaciones de Maxwell en el dominio de frecuencias, cuando no hay cargas libres. En general, ε, μ y la conductividad del medio σ son funciones de la frecuencia ω.
En un medio no conductor, $\sigma = 0$, combinando las ecuaciones (2.10) y (2.11) se tiene:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \frac{\omega^2 \epsilon \mu}{c^2}\mathbf{E} \tag{2.12}$$

y

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{H}) = \frac{\omega^2 \epsilon \mu}{c^2}\mathbf{H} \tag{2.13}$$

de las que usando la identidad vectorial $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla \cdot (\nabla \mathbf{A})$ y las ecuaciones (2.8) y (2.9) resultan las ecuaciones de onda o ecuaciones de Helmholtz homogéneas:

$$\nabla^2 \mathbf{E} + k^2 \mathbf{E} = 0 \tag{2.14}$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} + k^2 \mathbf{H} = 0 \tag{2.15}$$

con $k^2 = \varepsilon\mu\frac{\omega^2}{c^2}$ que deben satisfacer los campos en ausencia de cargas y corrientes libres.

2.2. Soluciones de las ecuaciones de los campos en coordenadas esféricas

Debido a que estamos interesados en estudiar configuraciones con simetría esférica, resulta conveniente utilizar coordenadas esféricas con vectores unitarios definidos como en la (Figura 2.2).

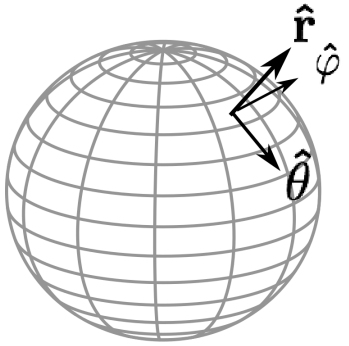

Figura 2.2: Versores del sistema de coordenadas que vamos a utilizar a lo largo de este trabajo.

Se puede construir una solución para las ecuaciones (2.14) y (2.15) que cumpla además con (2.10) y (2.11) a partir de [Dor10]:

$$\mathbf{N} = -\mathbf{r} \times \nabla\psi \tag{2.16}$$

donde ψ es una función escalar y el signo menos se ha puesto por conveniencia [BH98].
Del cálculo vectorial:

$$-\mathbf{r} \times \nabla\psi = \nabla \times (\mathbf{r}\psi) - \psi\nabla \times \mathbf{r} \tag{2.17}$$

El último término del lado derecho de la ecuación anterior es nulo, ya que el vector posición $\mathbf{r}$ es irrotacional. Además, al ser $\mathbf{N}$ un rotor, su divergencia es nula.
Introduciendo $\mathbf{N}$ en la ecuación de Helmholtz, y utilizando que $\nabla \times (\nabla^2\mathbf{r}\psi) = \nabla \times (\mathbf{r}\nabla^2\psi)$,

se tiene:

$$\nabla^2\mathbf{N} + k^2\mathbf{N} = \nabla \times [\mathbf{r}(\nabla^2\psi + k^2\psi)] \tag{2.18}$$

Entonces, $\mathbf{N}$ es solución de la ecuación de Helmholtz vectorial si ψ es una solución de la ecuación de Helmholtz escalar. En coordenadas esféricas:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sen(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sen(\theta)\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 sen(\theta)}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + k^2\psi = 0 \tag{2.19}$$

Si buscamos una solución en variables separadas, de la forma $\psi = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ que separe la ecuación en:

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m^2\Phi = 0 \tag{2.20}$$

$$\frac{1}{sen(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(sen(\theta)\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{sen^2(\theta)}\right]\Theta = 0 \tag{2.21}$$

y

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + [k^2r^2 - \ell(\ell+1)]R = 0 \tag{2.22}$$

Las soluciones de estas ecuaciones son bien conocidas y figuran en gran parte de la literatura sobre electromagnetismo y física cuantica [BH98].

Se obtiene para $\Phi(\phi)$:

$$\Phi = \exp(im\phi) \tag{2.23}$$

La condición de que Φ sea univaluada restringe los posibles valores de m a números reales enteros.

Pidiendo que las soluciones de (2.21) sean finitas en $\theta = 0$ y $\theta = \pi$, las funciones $\Theta(\theta)$ son combinaciones lineales de las funciones asociadas de Legendre de primera especie $P_\ell^m(cos(\theta))$ con $\ell = |m|, |m|+1, |m|+2, \ldots$. Estas funciones tienen las propiedades de ortogonalidad

$$\int_{-1}^{1} P_\ell^m(cos(\theta))P_{\ell'}^m(cos(\theta))d(cos(\theta)) = \frac{2}{2\ell+1}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\,\delta_{\ell\ell'} \tag{2.24}$$

$$\int_{-1}^{1} \frac{P_\ell^m(cos(\theta))P_\ell^{m'}(cos(\theta))}{sen^2(\theta)}d(cos(\theta)) = \frac{(\ell+m)!}{m(\ell-m)!}\,\delta_{mm'} \tag{2.25}$$

La solución de la parte angular de la ecuación (2.19), $Y_\ell^m(\theta,\phi) = A\Theta(\theta)\Phi(\phi)$, donde A es

un factor de normalización, está dada entonces por los armónicos esféricos:

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_l^m(cos(\theta)) \exp(im\phi) \tag{2.26}$$

que cumplen con la ortonormalidad:

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_\ell^m(\theta,\phi)\, Y_{\ell'}^{m'*}(\theta,\phi)\, sen(\theta)\, d\theta\, d\phi = \delta_{mm'}\delta_{\ell\ell'} \tag{2.27}$$

y la relación de completitud:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\theta,\phi)\, Y_\ell^m(\theta',\phi') = \delta[cos(\theta)-cos(\theta')]\delta(\phi-\phi') \tag{2.28}$$

En la ecuación radial (2.22), se puede hacer la substitución $R(r) = r^{-1/2}u_\ell(r)$, de manera que queda:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr} + k^2 - \frac{(l+\frac{1}{2})^2}{r^2}\right] u_\ell(r) = 0 \tag{2.29}$$

que representa una ecuación de Bessel con argumento semientero para $u_\ell(kr)$. Las soluciones para la parte radial vienen entonces dadas por las funciones de Bessel esféricas de kr

$$j_\ell(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\, J_{\ell+\frac{1}{2}}(kr) \tag{2.30}$$

junto con la funciones de Neumann

$$y_\ell(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\, Y_{\ell+\frac{1}{2}}(kr) \tag{2.31}$$

y las funciones de Hankel

$$h_\ell^{(1,2)}(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\, [J_{\ell+\frac{1}{2}}(kr) \pm iY_{\ell+\frac{1}{2}}(kr)] \tag{2.32}$$

son combinaciones lineales de las de Bessel y Neumann y representan ondas esféricas salientes $(+)$ y entrantes $(-)$. Si $x = kr$, las funciones esféricas de Bessel y Neumann se pueden obtener a partir de:

$$j_\ell(x) = (-x)^\ell \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell \left(\frac{sen(x)}{x}\right) \tag{2.33}$$

y

$$y_\ell(x) = -(-x)^\ell \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell \left(\frac{cos(x)}{x}\right) \tag{2.34}$$

Entonces, las funciones $\mathbf{N}_{\ell m} = -\mathbf{r} \times \nabla[f_\ell(kr)Y_\ell^m(\theta,\phi)] = f_\ell(kr)[-\mathbf{r} \times \nabla Y_\ell^m(\theta,\phi)]$, donde f_ℓ representa a las funciones de Bessel, Neumann o Hankel esféricas, son soluciones de la ecuación de Helmholtz vectorial (2.14) o (2.15).

Utilizando un procedimiento similar, se pueden definir las funciones $\mathbf{M}_{\ell m} = \nabla \times \mathbf{N}_{\ell m}$ que también verifican las ecuaciones (2.14) o (2.15).

Se definen los armónicos esféricos vectoriales:

$$\mathbf{X}_{\ell m}(\theta,\phi) = \frac{-i}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}\mathbf{r} \times \nabla Y_{\ell m}(\theta,\phi) \tag{2.35}$$

de manera que en términos de éstos y factores de normalización y conveniencia, las funciones $\mathbf{N}$ y $\mathbf{M}$ quedan definidas como:

$$\mathbf{N}_{\ell m}(\mathbf{r}) = j_\ell(kr)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{2.36}$$

$$\mathbf{M}_{\ell m}(\mathbf{r}) = \frac{i}{k}\nabla \times \mathbf{N}_{\ell m}(\mathbf{r}) \tag{2.37}$$

$$\mathbf{N}^+_{\ell m}(\mathbf{r}) = h^+_\ell(kr)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{2.38}$$

$$\mathbf{M}^+_{\ell m}(\mathbf{r}) = \frac{i}{k}\nabla \times \mathbf{N}^+_{\ell m}(\mathbf{r}) \tag{2.39}$$

$$\mathbf{N}^y_{\ell m}(\mathbf{r}) = y_\ell(kr)\mathbf{X}_{\ell m}(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{2.40}$$

$$\mathbf{M}^y_{\ell m}(\mathbf{r}) = \frac{i}{k}\nabla \times \mathbf{N}^y_{\ell m}(\mathbf{r}) \tag{2.41}$$

En componentes:

$$\mathbf{N}_{\ell m}(\mathbf{r}) = -\frac{e^{im\phi}}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} f_\ell(x)\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\left(\frac{mP_\ell^m(cos(\theta))}{sen(\theta)}\hat{\boldsymbol{\theta}} + i\frac{dP_\ell^m(cos(\theta))}{d\theta}\hat{\boldsymbol{\phi}}\right) \tag{2.42}$$

$$\mathbf{M}_{\ell m}(\mathbf{r}) = \frac{-1}{x\sqrt{\ell(\ell+1)}}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}e^{im\phi}\left\{f_\ell(x)[\ell(\ell+1)]P_\ell^m(cos(\theta))\hat{\boldsymbol{r}}\right.$$
$$\left.+[xf_\ell(x)]'\frac{dP_\ell^m(cos(\theta))}{d\theta}\hat{\boldsymbol{\theta}} + \frac{im}{sen(\theta)}P_\ell^m(cos(\theta))[xf_\ell(x)]'\hat{\boldsymbol{\phi}}\right\} \quad (2.43)$$

con $x = kr$ y $f_\ell(x)$ representando a las funciones de Bessel o de Hankel, según corresponda.

Algunas propiedades de los armónicos esféricos vectoriales que utilizaremos más adelante son:

$$\int_{4\pi} \mathbf{X}_{\ell m} \cdot \mathbf{X}^*_{\ell' m'}\, d\Omega = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \quad (2.44)$$

$$\int_{4\pi} (\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}) \cdot \mathbf{X}^*_{\ell' m'}\, d\Omega = 0 \quad (2.45)$$

$$\int_{4\pi} (\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}) \cdot (\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell' m'})\, d\Omega = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \quad (2.46)$$

Además, se puede ver que:

$$\int_{4\pi} \mathbf{M}_{\ell m} \cdot \mathbf{N}^*_{\ell' m'}\, d\Omega = 0 \quad (2.47)$$

para todo ℓ, ℓ' y m, m' y por su construcción, las $\mathbf{N}_{\ell m}$ sólo tienen componentes tangenciales, mientras que las $\mathbf{M}_{\ell m}$ tienen tanto componentes tangenciales como componente radial.
Dada la completitud de las funciones de Bessel esféricas y los armónicos esféricos, cualquier solución para la ecuación de Helmholtz escalar puede ser desarrollada como una suma infinita de combinaciones de estas funciones y cualquier solución de las ecuaciones de los campos puede ser desarrollada como una suma infinita de las funciones $\mathbf{N}_{\ell m}$ y $\mathbf{M}_{\ell m}$. En la figura 2.3 mostramos los vectores $\mathbf{N}(\theta, \phi)$ y $\mathbf{M}(\theta,\phi)$ sobre la superficie de una esfera. Nótese que sólo los vectores $\mathbf{M}$ tienen componentes radiales.

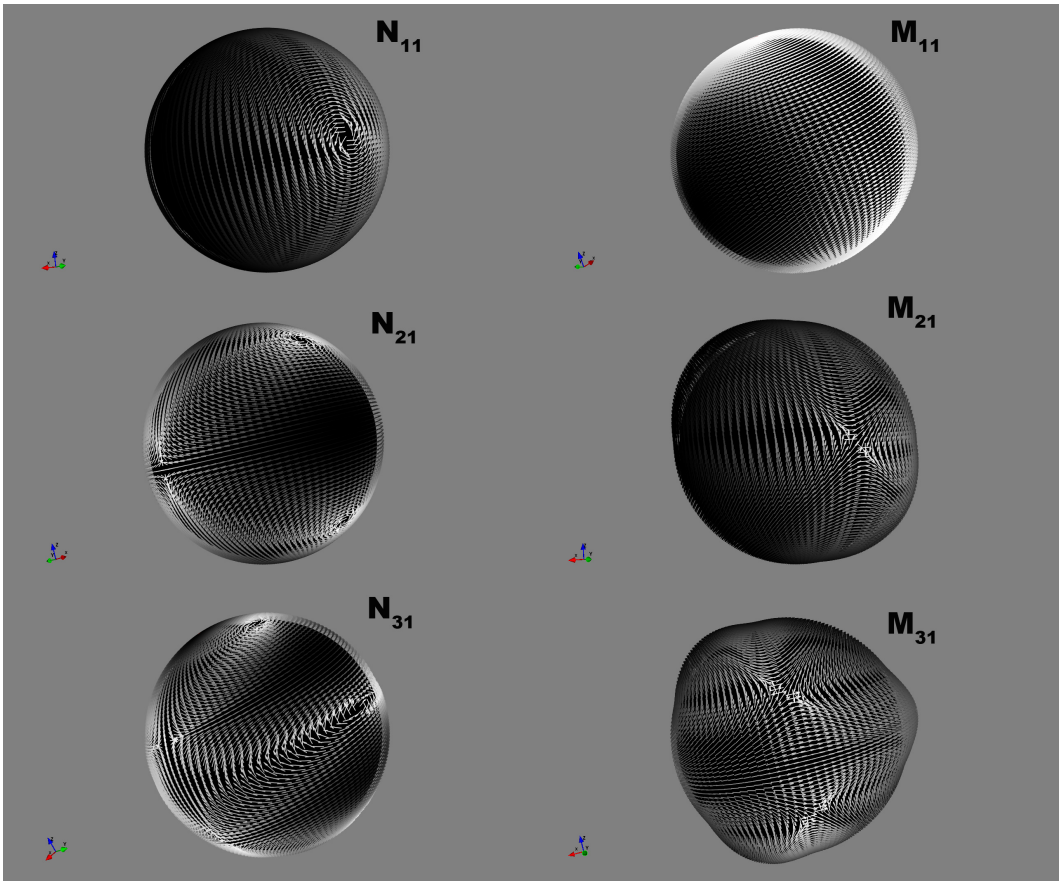

Figura 2.3: Algunas de las funciones $\mathbf{N}_{\ell,m}$ y $\mathbf{M}_{\ell,m}$ sobre la superficie de una esfera, sólo las funciones $\mathbf{M}$ tienen componentes radiales. En la versión electrónica se recomienda ampliar la figura para verla con mayor detalle.

2.3. Desarrollo de los campos

1. Los campos en el espacio 3, exterior a las dos esferas, son las sumas de los campos incidente y dispersado.

$$\mathbf{E}_3 = \mathbf{E}_{inc} + \mathbf{E}_{disp} \tag{2.48}$$

$$\mathbf{H}_3 = \mathbf{H}_{inc} + \mathbf{H}_{disp} \tag{2.49}$$

2. Para los campos incidentes utilizamos una onda plana.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E_0}\ \exp\left[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)\right] \tag{2.50}$$

A partir de la Ley de Faraday-Lenz:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\mu}{c}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \tag{2.51}$$

$$\mathbf{H} = -i\frac{c}{\mu\omega}\,\nabla \times \mathbf{E} = \frac{c}{\mu\omega}\,\mathbf{k} \times \mathbf{E} \tag{2.52}$$

como $|k| = \sqrt{\mu\varepsilon}\frac{\omega}{c}$, resulta la siguiente relación entre el campo eléctrico y el campo magnético:

$$\mathbf{H} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}\,\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E} \tag{2.53}$$

3. Los campos incidente y dispersado resultan:

$$\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell,m} a^{0E}_{\ell m}\,\mathbf{M}_{\ell m}(\mathbf{r}) + a^{0H}_{\ell m}\,\mathbf{N}_{\ell m}(\mathbf{r}) \tag{2.54}$$

$$\mathbf{H}_{inc}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}}\sum_{\ell,m} a^{0E}_{\ell m}\,\mathbf{N}_{\ell m}(\mathbf{r}) - a^{0H}_{\ell m}\,\mathbf{M}_{\ell m}(\mathbf{r}) \tag{2.55}$$

$$\mathbf{E}_{disp}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell,m} a^{+E}_{\ell m}\,\mathbf{M}^{+}_{\ell m}(\mathbf{r}) + a^{+H}_{\ell m}\,\mathbf{N}^{+}_{\ell m}(\mathbf{r}) \tag{2.56}$$

$$\mathbf{H}_{disp}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}}\sum_{\ell,m} a^{+E}_{\ell m}\,\mathbf{N}^{+}_{\ell m}(\mathbf{r}) - a^{+H}_{\ell m}\,\mathbf{M}^{+}_{\ell m}(\mathbf{r}) \tag{2.57}$$

Las formas (2.54) a (2.57) para los campos eléctrico y magnético fueron utilizadas por primera vez por Gustav Mie en 1908 [Mie08] y el tratamiento de la dispersión por una esfera que se utiliza a lo largo de este trabajo se conoce como dispersión de Mie. Los coeficientes $a^{0E}_{\ell m}$ y $a^{0H}_{\ell m}$ en los desarrollos (2.54) y (2.55) se eligen de manera que los campos incidentes representen una onda plana. Este desarrollo se muestra en la próxima sección. Los campos dispersados contienen funciones de Hankel esféricas de primera especie $h^{+}_{\ell}(kr)$ que representan ondas salientes.

4. En el espacio 2, entre las dos capas esféricas, los campos contienen las funciones esféricas de Bessel de primera y segunda especie $j_\ell(kr)$ e $y_\ell(kr)$ en su dependencia radial.

$$\mathbf{E}_2(\mathbf{r}) = \sum_{\ell,m} a^{2E}_{\ell m}\,\mathbf{M}_{\ell m}(\mathbf{r}) + a^{2H}_{\ell m}\,\mathbf{N}_{\ell m}(\mathbf{r}) + a^{2yE}_{\ell m}\,\mathbf{M}^{y}_{\ell m}(\mathbf{r}) + a^{2yH}_{\ell m}\,\mathbf{N}^{y}_{\ell m}(\mathbf{r}) \tag{2.58}$$

$$\mathbf{H}_2(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \sum_{\ell,m} a_{\ell m}^{2E}\, \mathbf{N}_{\ell m}(\mathbf{r}) - a_{\ell m}^{2H}\, \mathbf{M}_{\ell m}(\mathbf{r}) + a_{\ell m}^{2yE}\, \mathbf{N}_{\ell m}^{y}(\mathbf{r}) - a_{\ell m}^{2yH}\, \mathbf{M}_{\ell m}^{y}(\mathbf{r}) \quad (2.59)$$

5. Finalmente, en el espacio 1, interior a la capa esférica de radio R_1, la dependencia radial viene dada por funciones de Bessel esféricas de primera especie $j_\ell(kr)$ solamente, ya que las de segunda especie $y_\ell(kr)$ divergen en el origen

$$\mathbf{E}_1(\mathbf{r}) = \sum_{\ell,m} a_{\ell m}^{1E}\, \mathbf{M}_{\ell m}(\mathbf{r}) + a_{\ell m}^{1H}\, \mathbf{N}_{\ell m}(\mathbf{r}) \quad (2.60)$$

$$\mathbf{H}_1(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \sum_{\ell,m} a_{\ell m}^{1E}\, \mathbf{N}_{\ell m}(\mathbf{r}) - a_{\ell m}^{1H}\, \mathbf{M}_{\ell m}(\mathbf{r}) \quad (2.61)$$

de esta manera, las formas que vamos a utilizar para los campos en cada subespacio de nuestro arreglo vienen dadas por las ecuaciones (2.54), (2.55), (2.56) y (2.57) para el campo en el espacio exterior a las esferas, que denominamos 3. Para el espacio entre las esferas, que llamamos 2, los campos vienen dados por las ecuaciones (2.58) y (2.59) y finalmente, para el espacio dentro de la esfera interior, que denominamos 1, por (2.60) y (2.61). En la subsección siguiente hallaremos los coeficientes de las ecuaciones (2.54), (2.55) para que representen una onda plana incidente.

2.4. Desarrollo de una onda plana en armónicos esféricos vectoriales

Al haber simetría esférica, la dirección y polarización de la onda plana incidente se pueden elegir de manera arbitraria sin perder generalidad. Entonces vamos a considerar una onda que se propaga en la dirección $\hat{\mathbf{z}}$, con polarización en la dirección $\hat{\mathbf{x}}$. En coordenadas cartesianas, esto es:

$$\mathbf{E}_{inc} = E_0\, e^{i\,k\,r\,cos(\theta)}\, \hat{\mathbf{x}} \quad (2.62)$$

y el campo magnético se obtiene a partir de (2.53). En coordenadas esféricas:

$$\hat{\mathbf{x}} = sen(\theta)\, cos(\phi)\, \hat{\boldsymbol{r}} + cos(\theta)\, cos(\phi)\, \hat{\boldsymbol{\theta}} - sen(\phi)\, \hat{\boldsymbol{\phi}} \quad (2.63)$$

En términos de los armónicos esféricos vectoriales, los campos incidentes vienen dados por las ecuaciones (2.54) y (2.55). Si multiplicamos escalarmente cada una de estas ecuaciones por $\mathbf{N}^*_{\ell m}$, usamos la propiedad de ortogonalidad con los $\mathbf{M}_{\ell m}$ e integramos en un ángulo sólido de 4π, obtenemos de la ecuación (2.54), para el coeficiente $a^{0H}_{\ell m}$:

$$a^{0H}_{\ell m} = \frac{\displaystyle\int_{4\pi} \mathbf{E}_{inc} \cdot \mathbf{N}^*_{\ell m}\, d\Omega}{\displaystyle\int_{4\pi} \mathbf{N}_{\ell m} \cdot \mathbf{N}^*_{\ell m}\, d\Omega} \tag{2.64}$$

En el denominador se tiene:

$$\int_{4\pi} \mathbf{N}_{\ell m} \cdot \mathbf{N}^*_{\ell m} d\Omega = \int_{4\pi} j_\ell(kr)\mathbf{X}_{\ell m} \cdot j_{\ell m}(kr)\mathbf{X}^*_{\ell m} d\Omega = [j_\ell(kr)]^2 \tag{2.65}$$

donde se ha usado (2.44).

Para calcular la integral en el numerador de (2.64), podemos escribir los armónicos esféricos vectoriales $\mathbf{X}_{\ell m}$ en componentes a partir de (2.35).

$$\mathbf{X}_{\ell m} = -\frac{I_{\ell m}\, m}{\sqrt{\ell(\ell+1)}sen(\theta)} P^m_\ell(cos(\theta))\, e^{im\phi}\, \hat{\boldsymbol{\theta}} \; - i\frac{I_{\ell m}}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \frac{dP^m_\ell(cos(\theta))}{d\theta}\, e^{im\phi}\, \hat{\boldsymbol{\phi}} \tag{2.66}$$

con

$$I_{\ell m} = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi\;\;(\ell+m)!}} \tag{2.67}$$

la integral en el numerador de (2.64) resulta entonces:

$$\frac{E_0\, I_{\ell m}\, j_\ell(kr)}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \int_{4\pi} \Bigg[-\frac{cos(\theta)\, cos(\phi)\, m}{sen(\theta)}\, P^m_\ell(cos(\theta))\, e^{-im\phi} - \\ - i\, sen(\phi)\, \frac{dP^m_\ell(cos(\theta))}{d\theta}\, e^{-im\phi} \Bigg] e^{i\,k\,r\,cos(\theta)} sen(\theta) d\theta d\phi \tag{2.68}$$

Al integrar en ϕ, por la ortogonalidad de las funciones trigonométricas, tenemos solamente $m = \pm 1$, de manera que resulta

$$\frac{E_0\, I_{\ell,\pm 1}\, j_\ell(kr)\, \pi}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \int_0^\pi \left[\mp cos(\theta)\, P^{\pm 1}_\ell(cos(\theta)) \mp \frac{dP^{\pm 1}_\ell(cos(\theta))}{d\theta}\, sen(\theta) \right] e^{i\,k\,r\,cos(\theta)} d\theta \tag{2.69}$$

Esto es:

$$\frac{E_0\, I_{\ell,\pm 1}\, j_\ell(kr)\, \pi}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \int_0^\pi \frac{d}{d\theta} \left[\mp sen(\theta) P^{\pm 1}_\ell(cos(\theta)) \right] e^{i\,k\,r\,cos(\theta)} d\theta \tag{2.70}$$

Para la expresión (2.70) que corresponde a $m = +1$, se puede usar que [AS65]:

$$P_\ell^m(x) = (-1)^m(1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}\left[P_\ell(x)\right] \tag{2.71}$$

donde $P_\ell(x)$ es el polinomio de Legendre de grado ℓ, en nuestro caso tenemos

$$P_\ell^1(cos(\theta)) = \frac{dP_\ell(cos(\theta))}{d\theta} \tag{2.72}$$

Los polinomios de Legendre satisfacen la ecuación:

$$\frac{d}{d\theta}\left(sen(\theta)\frac{dP_\ell}{d\theta}\right) = -\ell(\ell+1)\ sen(\theta)\ P_\ell(cos(\theta)) \tag{2.73}$$

(ecuación (2.21) con $m = 0$). Entonces, (2.70) para $m = +1$ resulta:

$$\frac{E_0\ I_{\ell 1}\ j_\ell(kr)\ \pi}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}\int_0^\pi \ell(\ell+1)\ sen(\theta)\ P_\ell(cos(\theta))\ e^{i\,k\,r\,cos(\theta)}d\theta \tag{2.74}$$

que utilizando la siguiente relación [BH98] :

$$\int_0^\pi sen(\theta)\ P_\ell(cos(\theta))\ e^{i\,k\,r\,cos(\theta)}d\theta = 2i^\ell j_\ell(kr) \tag{2.75}$$

se puede escribir, luego de sustituir $I_{\ell 1}$ en la expresión (2.74):

$$a_{\ell,1}^{0H} = \frac{\frac{E_0\sqrt{2\ell+1}\ 2i^\ell\ \pi}{\sqrt{4\pi}}j_\ell(kr)j_\ell(kr)}{j_\ell(kr)j_\ell(kr)} = E_0\ i^\ell\ \sqrt{2\ell+1}\ \sqrt{\pi} \tag{2.76}$$

El coeficiente correspondiente a $m = -1$ se calcula utilizando que:

$$P_\ell^{-m} = (-1)^m\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}P_\ell^m \tag{2.77}$$

obteniendose la misma expresión para ese coeficiente.

$$a_{\ell,\pm 1}^{0H} = E_0\ i^\ell\ \sqrt{2\ell+1}\ \sqrt{\pi} \tag{2.78}$$

Para calcular el coeficiente $a_{\ell m}^{0E}$ podemos usar la ecuación (2.55).

Procediendo de manera análoga a lo que se hizo para $a_{\ell m}^{0H}$:

$$\mathbf{H}_{inc} = \sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}}\, E_0\, e^{i\,k\,r\,cos(\theta)}\, \hat{\mathbf{y}} \tag{2.79}$$

con

$$\hat{\mathbf{y}} = sen(\theta)\; sen(\phi)\; \hat{\boldsymbol{r}} + cos(\theta)\; sen(\phi)\; \hat{\boldsymbol{\theta}} + cos(\phi)\; \hat{\boldsymbol{\phi}} \tag{2.80}$$

y en este caso se obtiene:

$$a^{0E}_{\ell,\pm 1} = \mp E_0\; i^{\ell+1}\; \sqrt{2\ell+1}\; \sqrt{\pi} \tag{2.81}$$

De manera que los campos correspondientes a la onda plana incidente resultan:

$$\mathbf{E}_{inc} = E_0\; \sqrt{\pi} \sum_{\ell=1}^{\infty} \sqrt{2\ell+1}\; i^{\ell}\; [i(\mathbf{M}_{\ell,-1} - \mathbf{M}_{\ell,1}) + \mathbf{N}_{\ell,-1} + \mathbf{N}_{\ell,1}] \tag{2.82}$$

y

$$\mathbf{H}_{inc} = E_0\; \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}} \sum_{\ell=1}^{\infty} \sqrt{2\ell+1}\; i^{\ell}\; [i(\mathbf{N}_{\ell,-1} - \mathbf{N}_{\ell,1}) - (\mathbf{M}_{\ell,-1} + \mathbf{M}_{\ell,1})] \tag{2.83}$$

Recapitulando, nuestro problema se reduce al de encontrar una relación entre los coeficientes de la onda incidente $a^{0E}_{\ell m}$ y $a^{0H}_{\ell m}$ y los coeficientes $a^{+E}_{\ell m}$, $a^{+H}_{\ell m}$, $a^{1E}_{\ell m}$, $a^{1H}_{\ell m}$, $a^{2E}_{\ell m}$, $a^{2H}_{\ell m}$, $a^{2yE}_{\ell m}$ y $a^{2yH}_{\ell m}$ que describen los campos en las diferentes regiones a través de las expresiones (2.56), (2.57), (2.58), (2.59) (2.60) y (2.61).

2.5. Condiciones de Contorno en las Interfases

Para las condiciones de contorno que deben cumplir los campos en las superficies de las capas esféricas, voy utilizar las ecuaciones de Maxwell en su forma integral para medios isótropos y homogéneos:

$$\oiint_S \varepsilon \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{n}}\; da = 4\pi \iiint_V \rho\; dV \tag{2.84}$$

$$\oiint_S \mu \mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{n}}\; da = 0 \tag{2.85}$$

$$\oint_{\mathscr{C}} \mathbf{E} \cdot \mathbf{d}\ell = -\frac{d}{dt} \iint_S \mu \mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{n}}\; da \tag{2.86}$$

$$\oint_{\mathscr{C}} \mathbf{H} \cdot \mathbf{d}\ell = \frac{4\pi}{c}\sigma \iint_S \delta_S\; \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{n}}\; dS + \frac{1}{c}\frac{d}{dt} \iint_S \varepsilon \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{n}}\; dS \tag{2.87}$$

Siendo σ la conductividad superficial y δ_S una delta de Kronecker, que vale uno sobre la superficie de la interfase y cero fuera de ella.

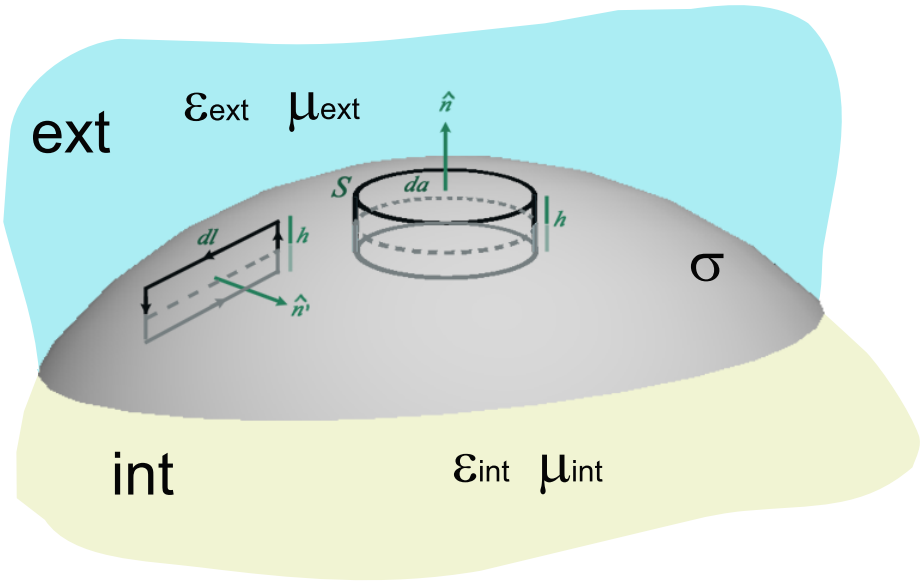

Figura 2.4: Diagrama de la superficie conductora separando dos medios interno y externo de diferente permitividad eléctrica y permeabilidad magnética. En el esquema se puede ver el circuito utilizado para obtener las relaciones entre los campos en los diferentes espacios.

Vamos a aplicar las ecuaciones (2.84) y (2.85) al volumen en forma de pastilla de la figura 2.4. El volumen de esta pastilla se puede hacer tender a cero tomando el límite cuando su altura tiende a cero. De esta manera, la integral en volumen del lado derecho de (2.84) se transforma en el area de la superficie por la densidad superficial de carge ρ_S. Entonces, se obtienen las siguientes dos condiciones para las componentes perpendiculares de los campos E y H en la interfase.

$$\varepsilon_{ext}\, E_{\perp}^{ext} - \varepsilon_{int}\, E_{\perp}^{int} = 4\pi\rho_S \tag{2.88}$$

y

$$\mu_{ext}\, H_{\perp}^{ext} - \mu_{int}\, H_{\perp}^{int} = 0 \tag{2.89}$$

En la que $E_\perp$ y $H_\perp$ se refieren a las componentes de los campos perpendiculares a la interfase.

A continuación aplicamos las ecuaciones (2.86) y (2.87) al circuito de la figura 2.4.

Tomando nuevamente el límite, ahora cuando la altura h del circuito tiende a cero, el área encerrada en el circuito tiende también a cero, con lo que la integral del lado derecho de (2.86) resultará nula. Esto implica la continuidad de las componentes tangenciales del campo eléctrico en la superficie de la esfera, y puede escribirse:

$$\hat{\boldsymbol{r}} \times (\mathbf{E_{ext}} - \mathbf{E_{int}}) = 0 \tag{2.90}$$

En la que hemos vuelto al sistema de coordenadas esférico donde $\hat{r}$ es el vector unitario radial, perpendicular a la superficie.

De (2.87), tomando $\hat{\mathbf{t}}$ un versor en la superficie, mediante el mismo procedimiento obtenemos:

$$(\hat{\mathbf{t}} \times \hat{\boldsymbol{r}}) \cdot (\mathbf{H}_{ext} - \mathbf{H}_{int})\, \Delta\ell = \frac{4\pi}{c}\sigma\, \mathbf{E}_{int} \cdot \hat{\mathbf{t}}\, \Delta\ell \tag{2.91}$$

donde dada la continuidad de las componentes tangenciales del campo eléctrico, se ha escogido el campo tangencial interior para representar esta componente del campo sobre la superficie.
Luego de reordenar los términos resulta:

$$\left[\hat{\boldsymbol{r}} \times (\mathbf{H}_{ext} - \mathbf{H}_{int}) - \frac{4\pi}{c}\sigma\, \mathbf{E}_{int}\right] \cdot \hat{\mathbf{t}} = 0 \tag{2.92}$$

La ecuación anterior implica:

$$\hat{\boldsymbol{r}} \times (\mathbf{H}_{ext} - \mathbf{H}_{int}) = \frac{4\pi}{c}\sigma \mathbf{E_{int\parallel}} \tag{2.93}$$

donde la componente tangencial del campo eléctrico viene dada por $\mathbf{E}_{\parallel} = \mathbf{E} - (\mathbf{E} \cdot \hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{r}}$.
Estas son condiciones generales que deben cumplir los campos a ambos lados de una interfase con conductividad entre dos medios, en las siguientes subsecciones aplicaremos estas condiciones a los campos en las regiones con permitividades ε_1, ε_2 y ε_3 que están separadas por cáscaras esféricas de grafeno para encontrar una relación entre los coeficientes de la onda incidente $a_{\ell m}^{0H}$ y $a_{\ell m}^{0E}$ y los coeficientes de los campos en las distintas regiones, $a_{\ell m}^{1E}$ y $a_{\ell m}^{1H}$ en la región 1, $a_{\ell m}^{2E}$, $a_{\ell m}^{2H}$, $a_{\ell m}^{2yE}$ y $a_{\ell m}^{2yH}$ en la región 2 y $a_{\ell m}^{+E}$ y $a_{\ell m}^{+H}$ en la región 3. Esto nos permitirá tener expresiones para los campos en las tres regiones a partir del campo debido a la onda plana incidente.

2.5.1. Condiciones de contorno en la capa esférica interior $r = R_1$

- Condición de contorno (2.90) en la superficie esférica interior, de radio R_1:

$$\sum_{\ell,m} a^{2E}_{\ell m}\, \hat{\boldsymbol{r}} \times \left(\frac{i}{k_2}\nabla \times j_\ell(k_2 r)\mathbf{X}_{\ell m}\right) + a^{2H}_{\ell m}\, \hat{\boldsymbol{r}} \times j_\ell(k_2 r)\mathbf{X}_{\ell m} + \\ + a^{2yE}_{\ell m}\, \hat{\boldsymbol{r}} \times \left(\frac{i}{k_2}\nabla \times y_\ell(k_2 r)\mathbf{X}_{\ell m}\right) + a^{2yH}_{\ell m}\, \hat{\boldsymbol{r}} \times y_\ell(k_2 r)\mathbf{X}_{\ell m} - \\ - \left[\sum_{\ell,m} a^{1E}_{\ell m}\, \hat{\boldsymbol{r}} \times \left(\frac{i}{k_1}\nabla \times j_\ell(k_1 r)\mathbf{X}_{\ell m}\right) + a^{1H}_{\ell m}\, \hat{\boldsymbol{r}} \times j_\ell(k_1 r)\mathbf{X}_{\ell m}\right] = 0 \quad (2.94)$$

Utilizando que

$$\hat{\boldsymbol{r}} \times (\nabla \times f_\ell(kr)\mathbf{X}_{\ell m}) = -\left(\frac{f_\ell(kr)}{r} + \frac{\partial f_\ell(kr)}{\partial r}\right)\mathbf{X}_{\ell m} \quad (2.95)$$

donde $f_\ell(kr)$ representa las funciones $j_\ell(kr)$, $y_\ell(kr)$ o $h^+_\ell(kr)$ según corresponda y multiplicando escalarmente por $\mathbf{X}^*_{\ell' m'}$ e integrando en un ángulo sólido de 4π y utilizando las propiedades (2.44) y (2.45), sólo sobreviven los términos correspondientes a multipolos magnéticos que contienen los coeficientes $a^{2E}_{\ell' m'}$, $a^{2yE}_{\ell' m'}$ y $a^{1E}_{\ell' m'}$, asociados a un modo transverso magnético TM. Se puede entonces despejar la relación entre los coeficientes:

$$\frac{1}{k_2} a^{2E}_{\ell m}\left(\frac{j_\ell(k_2 R_1)}{R_1} + \left[\frac{\partial j_\ell(k_2 r)}{\partial r}\right]_{r=R_1}\right) + \frac{1}{k_2} a^{2yE}_{\ell m}\left(\frac{y_\ell(k_2 R_1)}{R_1} + \left[\frac{\partial y_\ell(k_2 r)}{\partial r}\right]_{r=R_1}\right) - \\ - \frac{1}{k_1} a^{1E}_{\ell m}\left(\frac{j_\ell(k_1 R_1)}{R_1} + \left[\frac{\partial j_\ell(k_1 r)}{\partial r}\right]_{r=R_1}\right) = 0 \quad (2.96)$$

Si definimos $x_{ij} = k_i R_j$, entonces la ecuación anterior puede escribirse

$$x_{11}\,[x_{21}\, j_\ell(x_{21})]' a^{2E}_{\ell m} + x_{11}\,[x_{21}\, y_\ell(x_{21})]' a^{2yE}_{\ell m} - x_{21}\,[x_{11}\, j_\ell(x_{11})]' a^{1E}_{\ell m} = 0 \quad (2.97)$$

Volviendo a la ecuación (2.94), ahora siguiendo un procedimiento similar multiplicamos por $\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell' m'}$, utilizamos que

$$(\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}) \cdot (\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell' m'}) = (\hat{\boldsymbol{r}} \cdot \hat{\boldsymbol{r}})(\mathbf{X}_{\ell m} \cdot \mathbf{X}^*_{\ell' m'}) - (\hat{\boldsymbol{r}} \cdot \mathbf{X}^*_{\ell' m'})(\hat{\boldsymbol{r}} \cdot \mathbf{X}_{\ell m}) \quad (2.98)$$

en la que el último término es nulo, dado que las $\mathbf{X}_{\ell m}$ sólo tienen componentes tangenciales. Si integramos nuevamente en el ángulo sólido e invocamos las propiedades (2.44) y (2.45), sobreviven ahora sólo los términos que contienen a los coeficientes $a^{1H}_{\ell' m'}$, $a^{2H}_{\ell' m'}$ y $a^{2yH}_{\ell' m'}$ asociados a un modo transverso eléctrico TE. Ahora la relación entre los coeficientes resulta:

$$j_\ell(x_{21})\; a^{2H}_{\ell m} + y_\ell(x_{21})\; a^{2yH}_{\ell m} - j_\ell(x_{11})\; a^{1H}_{\ell m} = 0 \tag{2.99}$$

- Condición (2.93) en la superficie esférica interior, de radio R_1:

$$\begin{aligned}
&\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \sum_{\ell,m} \left[a^{2E}_{\ell m} j_\ell(k_2 r)\; \hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m} + \frac{i}{k_2} a^{2H}_{\ell m} \left(\frac{j_\ell(k_2 r)}{r} + \frac{\partial j_\ell(k_2 r)}{\partial r} \right) \mathbf{X}_{\ell m} + \right. \\
&\qquad \left. + a^{2yE}_{\ell m} y_\ell(k_2 r)\; \hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m} + \frac{i}{k_2} a^{2yH}_{\ell m} \left(\frac{y_\ell(k_2 r)}{r} + \frac{\partial y_\ell(k_2 r)}{\partial r} \right) \mathbf{X}_{\ell m} \right] - \\
&\quad - \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \sum_{\ell,m} \left[a^{1E}_{\ell m} j_\ell(k_1 r)\; \hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m} + \frac{i}{k_1} a^{1H}_{\ell m} \left(\frac{j_\ell(k_1 r)}{r} + \frac{\partial j_\ell(k_1 r)}{\partial r} \right) \mathbf{X}_{\ell m} \right] - \\
&- \frac{4\pi}{c} \sigma_1 \sum_{\ell,m} \left[\frac{i}{k_1} a^{1E}_{\ell m} \nabla \times j_\ell(k_1 r) \mathbf{X}_{\ell m} + a^{1H}_{\ell m} j_\ell(k_1 r) \mathbf{X}_{\ell m} - \left(-a^{1E}_{\ell m} \sqrt{\ell(\ell+1)} \frac{j_\ell(k_1 r)}{k_1 r} Y_{\ell m} \right) \hat{\boldsymbol{r}} \right] = 0
\end{aligned} \tag{2.100}$$

Donde se ha utilizado que

$$\hat{\boldsymbol{r}} \cdot \mathbf{E} = -\sum_{\ell,m} a^{E}_{\ell m} \sqrt{\ell(\ell+1)} \frac{f_\ell(kr)}{kr} Y_{\ell m} \tag{2.101}$$

en la que f_ℓ representa a j_ℓ, y_ℓ o h^+_ℓ según corresponda.

Nuevamente utilizamos el procedimiento de multiplicar escalarmente por $\mathbf{X}^*_{\ell' m'}$ e integrar en un ángulo sólido de 4π. Los términos que contienen $\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}$ desaparecen debido a las propiedades de perpendicularidad ya que los $\mathbf{X}_{\ell m}$ no tienen componentes radiales.

Para ver que el término que contiene $\nabla \times j_\ell(k_2 r) \mathbf{X}_{\ell m}$ se anula al multiplicar e integrar, debemos utilizar primero que:

$$\nabla \times f_\ell(kr) \mathbf{X}_{\ell m} = \frac{\partial f_\ell(kr)}{\partial r} \hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m} - \frac{i}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} f_\ell(kr) \left(\mathbf{r} \nabla^2 Y_{\ell m} - \nabla Y_{\ell m} \right) \tag{2.102}$$

Al multiplicar por $\mathbf{X}^*_{\ell' m'}$ e integrar, el primer término desaparece, al igual que el término que continene $\mathbf{r}\nabla^2 Y_{\ell m}$ ya que es radial. Utilizando la forma explícita de los armónicos esféricos vectoriales $\mathbf{X}_{\ell m}$ en términos de los armónicos esféricos $Y_{\ell m}$ dada por (2.35) para el término que contiene el producto con $\nabla Y_{\ell m}$, obviando constantes de normalización, se tiene:

$$\nabla Y_{\ell m} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla Y^*_{\ell' m'}) = \mathbf{r} \cdot (\nabla Y^*_{\ell' m'} \times \nabla Y_{\ell m}) \tag{2.103}$$

El gradiente de los armónicos esféricos es:

$$\nabla Y_{\ell m} = N \left(\frac{1}{r} \frac{\partial P^m_\ell (cos(\theta))}{\partial \theta} \exp{(im\phi)} \hat{\boldsymbol{\theta}} + \frac{1}{r sen(\theta)} P^m_\ell (cos(\theta))(im) \exp{(im\phi)} \hat{\boldsymbol{\phi}} \right) \tag{2.104}$$

donde N es un factor de normalización y las P^m_ℓ son las funciones asociadas de Legendre.

Para la integral de (2.103) en el ángulo sólido tenemos entonces:

$$\sum_{\ell,m} \int_0^{4\pi} \frac{i}{r^2 sen(\theta)} \exp{[i(m-m')\phi]} \left[m \frac{\partial P^{m'}_{\ell'} cos(\theta))}{\partial \theta} P^m_\ell (cos(\theta)) + \right.$$
$$\left. + m' P^{m'}_{\ell'} (cos(\theta)) \frac{\partial P^m_\ell (cos(\theta))}{\partial \theta} \right] sen(\theta) d\theta d\phi \tag{2.105}$$

Al integrar en ϕ sólo quedan los términos tales que $m = m'$ de manera que se tiene:

$$\sum_\ell \frac{2\pi i m'}{r^2} \int_0^\pi \frac{\partial [P^{m'}_{\ell'} (cos(\theta)) P^{m'}_\ell (cos(\theta))]}{\partial \theta} d\theta = \sum_\ell \frac{2\pi i m'}{r^2} \left[P^{m'}_{\ell'} (x) P^{m'}_\ell (x) \right]^{-1}_1 \tag{2.106}$$

con $x = cos(\theta)$.

Los polinomios asociados de Legendre, $P^m_\ell(x)$, valen cero en $x = -1$ y $x = 1$ cuando $m \neq 0$, por lo tanto la expresión anterior se anula en ese caso, y como m' multiplica a la suma, también vale cero cuando $m' = 0$, por lo tanto, toda la suma resulta nula. Entonces, al multiplicar escalarmente (2.100) por $\mathbf{X}^*_{\ell' m}$ en integrar en el ángulo sólido

de 4π queda:

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\left[x_{11}\,[x_{21}\,j_\ell(x_{21})]'a_{\ell m}^{2H}+x_{11}\,[x_{21}\,y_\ell(x_{21})]'a_{\ell m}^{2yH}\right]- \\ -\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}x_{21}\,[x_{11}\,j_\ell(x_{11})]'a_{\ell m}^{1H}+\frac{4\pi}{c}i\,\sigma_1\,x_{11}\,x_{21}\,j_\ell(x_{11})\,a_{\ell m}^{1H}=0 \quad (2.107)$$

Partimos nuevamente de (2.100), pero ahora multiplicamos escalarmente por $\hat{\boldsymbol{r}}\times\mathbf{X}_{\ell' m'}^*$ e integramos en el ángulo sólido de 4π. Utilizando la propiedad (2.45), los términos que contienen $a_{\ell m}^{1H}$, $a_{\ell m}^{2H}$ y $a_{\ell m}^{2yH}$ son los que desaparecen esta vez. El último término de (2.117) desaparece debido a que estamos multiplicando por una función que sólo tiene componentes tangenciales. Entonces queda además de los términos que contienen a $\hat{\boldsymbol{r}}\times\mathbf{X}_{\ell m}$, el término que contiene de la forma (2.102). Aquí tenemos:

$$\left[\frac{\partial f_\ell(kr)}{\partial r}\hat{\boldsymbol{r}}\times\mathbf{X}_{\ell m}-\frac{i}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}f_\ell(kr)\left(\mathbf{r}\nabla^2Y_{\ell m}-\nabla Y_{\ell m}\right)\right]\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}\times\mathbf{X}_{\ell' m'}^*) \quad (2.108)$$

Del producto con el primer término resulta $\partial f_\ell(kr)/\partial r$ luego de integrar. El producto con el término que contiene $\mathbf{r}\nabla^2Y_{\ell m}$ es nulo, ya que es radial y estamos multiplicando por un vector tangencial. Finalmente, del último término, tenemos:

$$\sum_{\ell,m}\int_0^{4\pi}\left(\frac{i}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}f_\ell(kr)\nabla Y_{\ell m}\right)\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}\times\mathbf{X}_{\ell' m'}^*)d\Omega \quad (2.109)$$

Aquí vamos a usar que:

$$\hat{\boldsymbol{r}}\times\mathbf{X}_{\ell' m'}^*=-\frac{i}{\sqrt{\ell'(\ell'+1)}}r\nabla Y_{\ell' m'}^* \quad (2.110)$$

y

$$\int_0^{4\pi}\nabla Y_{\ell m}\cdot\nabla Y_{\ell' m'}^*d\Omega=\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \quad (2.111)$$

Entonces, la expresión correspondiente a (2.108) resulta:

$$\frac{\partial j_\ell(k_2r)}{\partial r}+\frac{j_\ell(k_2r)}{r}=\frac{1}{r}[x_2\,j_\ell(x_2)]' \quad (2.112)$$

Luego, resulta la relación entre los coeficientes:

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\left[x_{11}\; j_\ell(x_{21})\; a^{2E}_{\ell m} + x_{11}\; y_\ell(x_{21})\; a^{2yE}_{\ell m}\right] - \\ - \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} x_{11}\; j_\ell(x_{11})\; a^{1E}_{\ell m} - \frac{4\pi}{c} i\; \sigma_1\; [x_{11} j_\ell(x_{11})]'\; a^{1E}_{\ell m} = 0 \quad (2.113)$$

2.5.2. Condiciones de contorno en la capa esférica exterior $r = R_2$

- Condición de contorno (2.90) en la superficie esférica exterior, de radio R_2:

$$\sum_{\ell,m} a^{0E}_{\ell m}\; \hat{\boldsymbol{r}} \times \left(\frac{i}{k_3}\nabla \times j_\ell(k_3 r)\mathbf{X}_{\ell m}\right) + a^{0H}_{\ell m}\; \hat{\boldsymbol{r}} \times j_\ell(k_3 r)\mathbf{X}_{\ell m} + \\ + a^{+E}_{\ell m}\; \hat{\boldsymbol{r}} \times \left(\frac{i}{k_3}\nabla \times h^+_\ell(k_3 r)\mathbf{X}_{\ell m}\right) + a^{+H}_{\ell m}\; \hat{\boldsymbol{r}} \times h^+_\ell(k_3 r)\mathbf{X}_{\ell m} - \\ - \left[\sum_{\ell,m} a^{2E}_{\ell m}\; \hat{\boldsymbol{r}} \times \left(\frac{i}{k_2}\nabla \times j_\ell(k_2 r)\mathbf{X}_{\ell m}\right) + a^{2H}_{\ell m}\; \hat{\boldsymbol{r}} \times j_\ell(k_2 r)\mathbf{X}_{\ell m} + \right. \\ \left. + a^{2yE}_{\ell m}\; \hat{\boldsymbol{r}} \times \left(\frac{i}{k_2}\nabla \times y_\ell(k_2 r)\mathbf{X}_{\ell m}\right) + a^{2yH}_{\ell m}\; \hat{\boldsymbol{r}} \times y_\ell(k_2 r)\mathbf{X}_{\ell m}\right] = 0 \quad (2.114)$$

Repitiendo el procedimiento utilizado para la capa interior, al multiplicar por $\mathbf{X}^*_{\ell' m'}$ e integrar se obtiene para los coeficientes:

$$x_{22}\; [x_{32}\; j_\ell(x_{32})]' a^{0E}_{\ell m} + x_{22}\; [x_{32}\; h^+_\ell(x_{32})]' a^{+E}_{\ell m} - \\ - x_{32}\; [x_{22}\; j_\ell(x_{22})]' a^{2E}_{\ell m} - x_{32}\; [x_{22}\; y_\ell(x_{22})]' a^{2yE}_{\ell m} = 0 \quad (2.115)$$

si se multiplica (2.114) por $\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell' m'}$ y se integra, se obtiene:

$$j_\ell(x_{32})\; a^{0H}_{\ell m} + h^+_\ell(x_{32})\; a^{+H}_{\ell m} - j_\ell(x_{22})\; a^{2H}_{\ell m} - y_\ell(x_{22})\; a^{2yH}_{\ell m} = 0 \quad (2.116)$$

- Condición de contorno (2.93) en la superficie esférica exterior, de radio R_2:

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}}\sum_{\ell,m}\left[a^{0E}_{\ell m}j_\ell(k_3r)\;\hat{\boldsymbol{r}}\times\mathbf{X}_{\ell m}+\frac{i}{k_3}a^{0H}_{\ell m}\left(\frac{j_\ell(k_3r)}{r}+\frac{\partial j_\ell(k_3r)}{\partial r}\right)\mathbf{X}_{\ell m}+\right.$$
$$\left.+a^{+E}_{\ell m}h^+_\ell(k_3r)\;\hat{\boldsymbol{r}}\times\mathbf{X}_{\ell m}+\frac{i}{k_3}a^{+H}_{\ell m}\left(\frac{h^+_\ell(k_3r)}{r}+\frac{\partial h^+_\ell(k_3r)}{\partial r}\right)\mathbf{X}_{\ell m}\right]-$$
$$-\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\sum_{\ell,m}\left[a^{2E}_{\ell m}j_\ell(k_2r)\;\hat{\boldsymbol{r}}\times\mathbf{X}_{\ell m}+\frac{i}{k_2}a^{2H}_{\ell m}\left(\frac{j_\ell(k_2r)}{r}+\frac{\partial j_\ell(k_2r)}{\partial r}\right)\mathbf{X}_{\ell m}+\right.$$
$$\left.+a^{2yE}_{\ell m}y_\ell(k_2r)\;\hat{\boldsymbol{r}}\times\mathbf{X}_{\ell m}+\frac{i}{k_2}a^{2yH}_{\ell m}\left(\frac{y_\ell(k_2r)}{r}+\frac{\partial j_\ell(k_2r)}{\partial r}\right)\mathbf{X}_{\ell m}\right]-$$
$$-\frac{4\pi}{c}\sigma_2\sum_{\ell,m}\left[\frac{i}{k_2}a^{2E}_{\ell m}\nabla\times j_\ell(k_2r)\mathbf{X}_{\ell m}+a^{2H}_{\ell m}j_\ell(k_2r)\mathbf{X}_{\ell m}+\frac{i}{k_2}a^{2yE}_{\ell m}\nabla\times y_\ell(k_2r)\mathbf{X}_{\ell m}+\right.$$
$$\left.+a^{2yH}_{\ell m}y_\ell(k_2r)\mathbf{X}_{\ell m}-\left(-a^{2E}_{\ell m}\sqrt{\ell(\ell+1)}\frac{j_\ell(k_2r)}{k_2r}Y_{\ell m}-a^{2yE}_{\ell m}\sqrt{\ell(\ell+1)}\frac{y_\ell(k_2r)}{k_2r}Y_{\ell m}\right)\hat{\boldsymbol{r}}\right]=0 \tag{2.117}$$

Si de nuevo multiplicamos escalarmente por $\mathbf{X}^*_{\ell'm'}$ e integramos en un ángulo sólido de 4π, se tiene:

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}}\left[x_{22}\,[x_{32}\,j_\ell(x_{32})]'a^{0H}_{\ell m}+x_{22}\,[x_{32}\,h^+_\ell(x_{32})]'a^{+H}_{\ell m}\right]-$$
$$-\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\left[x_{32}\,[x_{22}\,j_\ell(x_{22})]'a^{2H}_{\ell m}+x_{32}\,[x_{22}\,y_\ell(x_{22})]'a^{2yH}_{\ell m}\right]+$$
$$+\frac{4\pi}{c}i\;\sigma_2\;x_{22}\;x_{32}\;\left[j_\ell(x_{22})\;a^{2H}_{\ell m}+y_\ell(x_{22})\;a^{2yH}_{\ell m}\right]=0 \tag{2.118}$$

Si ahora multiplicamos por $\hat{\boldsymbol{r}}\times\mathbf{X}^*_{\ell'm'}$ en integramos:

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}}\left[x_{22}\,j_\ell(x_{32})\;a^{0E}_{\ell m}+x_{22}\,h^+_\ell(x_{32})\;a^{+E}_{\ell m}\right]-$$
$$-\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\left[x_{22}\,j_\ell(x_{22})\;a^{2E}_{\ell m}+x_{22}\,y_\ell(x_{22})\;a^{2yE}_{\ell m}\right]-$$
$$-\frac{4\pi}{c}i\;\sigma_2\;\left[[x_{22}\,j_\ell(x_{22})]'\;a^{2E}_{\ell m}+[x_{22}\,y_\ell(x_{22})]'\;a^{2yE}_{\ell m}\right]=0 \tag{2.119}$$

Esto completa los dos conjuntos de cuatro ecuaciones para los coeficientes de los campos en términos de los coeficientes del campo incidente $a^{0E}_{\ell m}$ y $a^{0H}_{\ell m}$. El primer conjunto relaciona los coeficientes que contienen un supraíndice E, que se puede demostrar que corresponden a ondas en un modo transverso magnético y el segundo,con supraíndices H a un modo

transverso eléctrico de los campos de radiación [BH98, Dor10].

2.6. Coeficientes de Transmisión

2.6.1. Modo transverso magnético

Las ecuaciones que relacionan los coeficientes correspondientes a cada modo, vienen dadas por (2.97), (2.113), (2.115) y (2.119). Para encontrar el coeficiente de transmisión T_ℓ^H que relaciona los coeficientes de la onda plana incidente y la onda dispersada en el modo transverso magnético, debemos resolver el sistema de ecuaciones:

$$x_{11}\,[x_{21}\,j_\ell(x_{21})]'a_{\ell m}^{2E} + x_{11}\,[x_{21}\,y_\ell(x_{21})]'a_{\ell m}^{2yE} - x_{21}\,[x_{11}\,j_\ell(x_{11})]'a_{\ell m}^{1E} = 0 \tag{2.120}$$

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\left[x_{11}\,j_\ell(x_{21})\,a_{\ell m}^{2E} + x_{11}\,y_\ell(x_{21})\,a_{\ell m}^{2yE}\right] - \\ - \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}x_{11}\,j_\ell(x_{11})\,a_{\ell m}^{1E} - \frac{4\pi}{c}i\,\sigma_1\,[x_{11}j_\ell(x_{11})]'\,a_{\ell m}^{1E} = 0 \tag{2.121}$$

$$x_{22}\,[x_{32}\,j_\ell(x_{32})]'a_{\ell m}^{0E} + x_{22}\,[x_{32}\,h_\ell^+(x_{32})]'a_{\ell m}^{+E} - \\ - x_{32}\,[x_{22}\,j_\ell(x_{22})]'a_{\ell m}^{2E} - x_{32}\,[x_{22}\,y_\ell(x_{22})]'a_{\ell m}^{2yE} = 0 \tag{2.122}$$

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}}\left[x_{22}\,j_\ell(x_{32})\,a_{\ell m}^{0E} + x_{22}\,h_\ell^+(x_{32})\,a_{\ell m}^{+E}\right] - \\ - \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\left[x_{22}\,j_\ell(x_{22})\,a_{\ell m}^{2E} + x_{22}\,y_\ell(x_{22})\,a_{\ell m}^{2yE}\right] - \\ - \frac{4\pi}{c}i\,\sigma_2\,\left[[x_{22}\,j_\ell(x_{22})]'\,a_{\ell m}^{2E} + [x_{22}\,y_\ell(x_{22})]'\,a_{\ell m}^{2yE}\right] = 0 \tag{2.123}$$

En lo que sigue voy a utilizar la notación dj_{ij}^ℓ para referirme a las expresiones $[x_{ij}j_\ell(x_{ij})]'$, dy_{ij}^ℓ para $[x_{ij}y_\ell(x_{ij})]'$ y dh_{ij}^ℓ para $[x_{ij}h_\ell^+(x_{ij})]'$. Las dos primeras, a menos de un signo, representan las derivadas de las funciones de Ricatti-Bessel [AS65].

A partir de la ecuación (2.120) se puede despejar $a_{\ell m}^{1E}$ en términos de $a_{\ell m}^{2E}$ y $a_{\ell m}^{2yE}$.

$$a_{\ell m}^{1E} = \frac{x_{11} dj_{21}^{\ell} a_{\ell m}^{2E} + x_{11} dy_{21}^{\ell} a_{\ell m}^{2yE}}{x_{21} dj_{11}^{\ell}} \tag{2.124}$$

Reemplazando la expresión anterior en (2.121) se obtiene:

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \left(x_{11} j_{\ell}(x_{21}) a_{\ell m}^{2E} + x_{11} y_{\ell}(x_{21}) a_{\ell m}^{2yE} \right) - \\ - \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} x_{11} j_{\ell}(x_{11}) \left[\frac{x_{11} dj_{21}^{\ell} a_{\ell m}^{2E} + x_{11} dy_{21}^{\ell} a_{\ell m}^{2yE}}{x_{21} dj_{11}^{\ell}} \right] - \\ - \frac{4\pi}{c} \sigma_1 i dj_{11}^{\ell} \left[\frac{x_{11} dj_{21}^{\ell} a_{\ell m}^{2E} + x_{11} dy_{21}^{\ell} a_{\ell m}^{2yE}}{x_{21} dj_{11}^{\ell}} \right]\end{aligned} \tag{2.125}$$

Esta última ecuación puede resolverse para $a_{\ell m}^{2yE}$ en términos de $a_{\ell m}^{2E}$, definiendo la relación entre estos coeficientes como $a_{\ell m}^{2yE} = A_{\ell m}^{H} a_{\ell m}^{2E}$, resulta:

$$A_{\ell m}^{H} = \frac{-\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} x_{11} j_{\ell}(x_{21}) x_{21} dj_{11}^{\ell} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} x_{11} j_{\ell}(x_{11}) x_{11} dj_{21}^{\ell} + \frac{4\pi}{c} \sigma_1 i dj_{11}^{\ell} x_{11} dj_{21}^{\ell}}{\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} x_{11} y_{\ell}(x_{21}) x_{21} dj_{11}^{\ell} - \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} x_{11} j_{\ell}(x_{11}) dy_{21}^{\ell} - \frac{4\pi}{c} \sigma_1 i dj_{11}^{\ell} x_{11} dy_{21}^{\ell}} \tag{2.126}$$

Utilizando que $x_{11} = \sqrt{\varepsilon_1 \mu_1} k_0 R_1 = \sqrt{\varepsilon_1 \mu_1} x_{01}$ y una relación análoga para x_{21}, dividiendo el numerador y el denominador por $x_{11} x_{01}$ y usando que $x_{01} = \frac{\omega}{c} R_1$. Definiendo $g_1(\omega) = \frac{4\pi i \sigma_1}{\omega R_1}$, resulta:

$$A_{\ell m}^{H} = \frac{-\varepsilon_2 j_{\ell}(x_{21}) dj_{11}^{\ell} + \varepsilon_1 j_{\ell}(x_{11}) dj_{21}^{\ell} + g_1(\omega) dj_{11}^{\ell} dj_{21}^{\ell}}{\varepsilon_2 y_{\ell}(x_{21}) dj_{11}^{\ell} - \varepsilon_1 j_{\ell}(x_{11}) dy_{21}^{\ell} - g_1(\omega) dj_{11}^{\ell} dy_{21}^{\ell}} \tag{2.127}$$

Reemplazando $a_{\ell m}^{2yE}$ en (2.122) y despejando $a_{\ell m}^{2E}$ se tiene:

$$a_{\ell m}^{2E} = \frac{x_{22} dj_{32}^{\ell} a_{\ell m}^{0E} + x_{22} dh_{32}^{\ell} a_{\ell m}^{+E}}{x_{32} dj_{22}^{\ell} + x_{32} dy_{22}^{\ell} A_{\ell m}^{H}} \tag{2.128}$$

Reemplazando en (2.123), definiendo el coeficiente de transmisión $T_{\ell m}^{H}$ de manera que $a_{\ell m}^{+E} = T_{\ell m}^{H} a_{\ell m}^{0E}$, se tiene para el coeficiente:

$$T_{\ell m}^{H} = \frac{\sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}} x_{22} x_{32} \left[dj_{22}^{\ell} + dy_{22}^{\ell} A_{\ell m}^{H} \right] j_{\ell}(x_{32}) - \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} x_{22}^2 \left[j_{\ell}(x_{22}) + y_{\ell}(x_{22}) A_{\ell m}^{H} \right] dj_{32}^{\ell} - \frac{4\pi}{c} \sigma_2 i x_{22} \left[dj_{22}^{\ell} + dy_{22}^{\ell} A_{\ell m}^{H} \right] dj_{32}^{\ell}}{-\sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}} x_{22} x_{32} \left[dj_{22}^{\ell} + dy_{22}^{\ell} A_{\ell m}^{H} \right] dh_{32}^{\ell} + \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} x_{22}^2 \left[j_{\ell}(x_{22}) + y_{\ell}(x_{22}) A_{\ell m}^{H} \right] dh_{32}^{\ell} + \frac{4\pi}{c} \sigma_2 i x_{22} \left[dj_{22}^{\ell} + dy_{22}^{\ell} A_{\ell m}^{H} \right] dh_{32}^{\ell}} \tag{2.129}$$

Utilizando como antes que $x_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \mu_i} k_0 R_j$, dividiendo el numerador y el denominador

de la ecuación anterior por $x_{02}x_{22}$ resulta:

$$T^H_{\ell m} = \frac{\varepsilon_3 \left[dj^\ell_{22} + dy^\ell_{22} A^H_{\ell m}\right] j_\ell(x_{32}) - \varepsilon_2 \left[j_\ell(x_{22}) + y_\ell(x_{22}) A^H_{\ell m}\right] dj^\ell_{32} - g_2(\omega) \left[dj^\ell_{22} + dy^\ell_{22} A^H_{\ell m}\right] dj^\ell_{32}}{-\varepsilon_3 \left[dj^\ell_{22} + dy^\ell_{22} A^H_{\ell m}\right] dh^\ell_{32} + \varepsilon_2 \left[j_\ell(x_{22}) + y_\ell(x_{22}) A^H_{\ell m}\right] dh^\ell_{32} + g_2(\omega) \left[dj^\ell_{22} + dy^\ell_{22} A^H_{\ell m}\right] dh^\ell_{32}} \tag{2.130}$$

2.6.2. Modo transverso eléctrico

Por otro lado queda un segundo conjunto de cuatro ecuaciones, (2.99), (2.107), (2.116) y (2.118) para el modo transverso eléctrico (los coeficientes que llevan el supraíndice H). Las ecuaciones a utilizar en este modo son:

$$j_\ell(x_{21})\, a^{2H}_{\ell m} + y_\ell(x_{21})\, a^{2yH}_{\ell m} - j_\ell(x_{11})\, a^{1H}_{\ell m} = 0 \tag{2.131}$$

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \left[x_{11}\, dj^\ell_{21} a^{2H}_{\ell m} + x_{11}\, dy^\ell_{21} a^{2yH}_{\ell m}\right] - \\ - \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} x_{21}\, dj^\ell_{11} a^{1H}_{\ell m} + \frac{4\pi}{c} i\, \sigma_1\, x_{11}\, x_{21}\, j_\ell(x_{11})\, a^{1H}_{\ell m} = 0 \tag{2.132}$$

$$j_\ell(x_{32})\, a^{0H}_{\ell m} + h^+_\ell(x_{32})\, a^{+H}_{\ell m} - j_\ell(x_{22})\, a^{2H}_{\ell m} - y_\ell(x_{22})\, a^{2yH}_{\ell m} = 0 \tag{2.133}$$

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}} \left[x_{22}\, dj^\ell_{32} a^{0H}_{\ell m} + x_{22}\, dh^\ell_{32} a^{+H}_{\ell m}\right] - \\ - \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \left[x_{32}\, dj^\ell_{22} a^{2H}_{\ell m} + x_{32}\, dy^\ell_{22} a^{2yH}_{\ell m}\right] + \\ + \frac{4\pi}{c} i\, \sigma_2\, x_{22}\, x_{32} \left[j_\ell(x_{22})\, a^{2H}_{\ell m} + y_\ell(x_{22})\, a^{2yH}_{\ell m}\right] = 0 \tag{2.134}$$

de (2.131) resulta:

$$a^{1H}_{\ell m} = \frac{j_\ell(x_{21}) a^{2H}_{\ell m} + y_\ell(x_{21}) a^{2yH}_{\ell m}}{j_\ell(x_{11})} \tag{2.135}$$

Reemplazando la expresión anterior en (2.132), despejando esa ecuación para $a^{2yH}_{\ell m}$ en términos de $a^{2H}_{\ell m}$, definiendo $A^E_{\ell m}$ de manera que $a^{2yH}_{\ell m} = A^E_\ell a^{2H}_{\ell m}$, resulta ahora:

$$A^E_\ell = \frac{\frac{1}{\mu_2} j_\ell x_{11} dj^\ell_{21} - \frac{1}{\mu_1} j_\ell(x_{21}) dj^\ell_{11} + g_1(\omega) j_\ell(x_{21}) j_\ell(x_{11})}{-\frac{1}{\mu_2} j_\ell(x_{11}) dy^\ell_{21} + \frac{1}{\mu_1} y_\ell(x_{21}) dj^\ell_{11} - g_1(\omega) j_\ell(x_{21}) j_\ell(x_{11})} \tag{2.136}$$

Substituyendo en (2.133):

$$a_{\ell m}^{2H} = \frac{j_\ell(x_{32})a_{\ell m}^{0H} + h_{\ell m}^{+}(x_{32})a_{\ell m}^{+H}}{j_\ell(x_{22}) + y_\ell(x_{22})A_\ell^E} \tag{2.137}$$

Finalmente, substituyendo en (2.134), se tiene:

$$T_\ell^E = \frac{\frac{1}{\mu_3}dj_{32}^\ell\left[j_\ell(x_{22}) + y_\ell(x_{22})A_\ell^E\right] - \frac{1}{\mu_2}j_\ell(x_{32})\left[dj_{22}^\ell + dy_{22}^\ell A_\ell^E\right] + g_2(\omega)x_{02}^2 j_\ell(x_{32}\left[j_\ell(x_{22}) + y_\ell(x_{22})A_\ell^E\right]}{-\frac{1}{\mu_3}dh_{32}^\ell\left[j_\ell(x_{22}) + y_\ell(x_{22})A_\ell^E\right] + \frac{1}{\mu_2}h_\ell^+(x_{32})\left[dj_{22}^\ell + dy_{22}^\ell A_\ell^E\right] - g_2(\omega)x_{02}^2 h_\ell^+(x_{32})\left[j_\ell(x_{22}) + y_\ell(x_2 2)A_\ell^E\right]} \tag{2.138}$$

En esta sección hemos obtenido los coeficientes de transmisión T_ℓ^E ec. (2.138) y $T_{\ell m}^H$ ec. (2.130) que relacionan a los coeficientes de la onda dispersada $a_{\ell m}^{+E}$ y $a_{\ell m}^{+H}$ con los correspondientes a la onda incidente $a_{\ell,m}^{0E}$ y $a_{\ell,m}^{0H}$. Estos coeficientes de transmisión acoplan los multipolos, representados por ℓ, de la onda incidente a los multipolos del mismo orden en la onda dispersada y no dependen del índice m. Todas las cantidades de interés como secciones eficaces, campos cercanos, campos de radiación, etc, se determinan a partir de los coeficientes calculados.

2.7. Flujo de Energía

Nos interesa conocer los flujos de energía a partir de la onda incidente, esto es, cuánta de la energía incidente es irradiada en las ondas salientes y qué porción es disipada en cada capa esférica debido al efecto Joule.

El promedio temporal del flujo de energía a través de una unidad de superficie viene dado por:

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{c}{8\pi} Re\{\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*\} \tag{2.139}$$

Luego, la potencia que atraviesa una superficie esférica de radio r se obtiene integrando este vector en la dirección perpendicular a esta superficie en cada punto, sobre la superficie esférica:

$$P = \frac{c}{8\pi} \int_{4\pi} Re\{\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*\} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}\, r^2 d\Omega \tag{2.140}$$

Se puede definir una potencia de extinción, de aquí en más P_{ext}, como la potencia que es removida de la radiación incidente, entonces:

$$P_{ext} = P_{abs} + P_{disp} \tag{2.141}$$

Utilizando las expresiones de los campos dispersados (2.56) y (2.57) en (2.140), se puede obener la potencia dispersada como el flujo del vector de Poyting debido a los campos dispersados, saliente a través de una superficie esférica de radio r mayor que los radios de las esferas de grafeno. Luego de hacer una permutación en los productos escalar y vectorial, resulta:

$$P_{disp} = \frac{c}{8\pi} \int_{4\pi} Re\{(\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{E}_{disp}) \cdot \mathbf{H}^*_{disp}\}\, r^2 d\Omega \tag{2.142}$$

Utilizando propiedades de los armónicos esféricos vectoriales, el producto vectorial resulta:

$$\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{E}_{disp} = \sum_{\ell,m} \left[-\frac{i}{k_3} a^{+E}_{\ell m} \left(\frac{h^+_\ell(kr)}{r} + \frac{\partial h^+_\ell(kr)}{\partial r} \right) \mathbf{X}_{\ell m} + a^{+H}_{\ell m} h^+_\ell(kr)\, \hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m} \right] \tag{2.143}$$

Y para el complejo conjugado del campo magnético:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^*_{disp} = & \sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}} \sum_{\ell,m} a^{+E*}_{\ell m}\, h^-_\ell(kr)\, \mathbf{X}^*_{\ell m} + \\ & + \frac{i}{k}\, a^{+H*}_{\ell m} \left[\frac{\partial h^-_\ell(kr)}{\partial r} \hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}^*_{\ell m} + \frac{i}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}\, h^-_\ell(kr) \left(\mathbf{r}\nabla^2 Y^*_{\ell m} - \nabla Y^*_{\ell m} \right) \right] \end{aligned} \tag{2.144}$$

donde se ha utilizado (2.102) y que $h^{+*}_\ell(kr) = h^-_\ell(kr)$.

En virtud de (2.44), (2.45) y (2.98), las integrales que contienen productos entre los armónicos esféricos vectoriales $\mathbf{X}_{\ell m}$ y/o $\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}$ son sencillas. Por otro lado, las integrales que contienen el producto con $\mathbf{r}\nabla^2 Y^*_{\ell' m'}$ son cero, ya que los armónicos esféricos vectoriales $\mathbf{X}_{\ell m}$ y $\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{X}_{\ell m}$ no tienen componente radial.

Las restantes integrales tienen las formas (2.103) y (2.109).

Resulta entonces:

$$\begin{aligned} P_{disp} = \frac{c}{8\pi} \sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}} Re \Bigg[\sum_{\ell,m} & -\frac{i}{k_3} |a^{+E}_{\ell m}|^2 \left(\frac{h^+_\ell(kr)}{r} + \frac{\partial h^+_\ell(kr)}{\partial r} \right) h^-_\ell(kr) + \\ & + \frac{i}{k_3} |a^{+H}_{\ell m}|^2 \left(\frac{h^-_\ell(kr)}{r} + \frac{\partial h^-_\ell(kr)}{\partial r} \right) h^+_\ell(kr) \Bigg] r^2 \end{aligned} \tag{2.145}$$

donde quedan productos de la forma $h^+_\ell(kr) h^-_\ell(kr)$ que resulta real, por lo tanto no van a aportar a la potencia dispersada y los productos de las funciones de Hankel de primera especie con la derivada de las funciones de Hankel de segunda especie y vice versa. Tomando

el primero de ellos y escribiendolo en términos de las funciones $j_\ell(kr)$ e $y_\ell(kr)$ resulta:

$$\frac{\partial h_\ell^+(kr)}{\partial r} h_\ell^-(kr) = j_\ell(kr)\frac{\partial j_\ell(kr)}{\partial r} + \frac{\partial y_\ell(kr)}{\partial r} y_\ell(kr) - i\left(\frac{\partial j_\ell(kr)}{\partial r} y_\ell(kr) - j_\ell(kr)\frac{\partial y_\ell(kr)}{\partial r}\right) \tag{2.146}$$

Donde sólo la parte imaginaria aporta a la potencia dispersada. Esta parte puede rescribirse:

$$i\left(\frac{\partial y_\ell(kr)}{\partial r} j_\ell(kr) - y_\ell(kr)\frac{\partial j_\ell(kr)}{\partial r}\right) = ik[j_\ell(kr)y'_\ell(kr) - j'_\ell(kr)y_\ell(kr)] \tag{2.147}$$

la cantidad entre corchetes es el Wronskiano de j_ℓ y y_ℓ, usando que $W[j_\ell(\rho),y_\ell(\rho)] = \rho^{-2}$ y haciendo lo mismo con el otro producto, se tiene:

$$P_{disp} = \frac{c}{8\pi}\sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}}\frac{1}{k_3^2}\sum_{\ell,m} |a_{\ell m}^{+E}|^2 + |a_{\ell m}^{+H}|^2 \tag{2.148}$$

De manera similar se puede calcular la potencia absorbida, como el flujo entrante en la misma esfera de radio r, del vector de Poynting debido a los campos totales en el espacio exterior a las superficies de grafeno [Jac99]. Esto es:

$$P_{abs} = -\frac{c}{8\pi}\int_{4\pi} Re\{(\mathbf{E}_{inc} + \mathbf{E}_{disp}) \times (\mathbf{H}_{inc}^* + \mathbf{H}_{disp}^*)\} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}\, r^2 d\Omega \tag{2.149}$$

Que utilizando una permutación cíclica de los productos de vectores, resulta:

$$P_{abs} = -\frac{c}{8\pi}\int_{4\pi} Re\{[\hat{\mathbf{r}} \times (\mathbf{E}_{inc} + \mathbf{E}_{disp})] \cdot (\mathbf{H}_{inc}^* + \mathbf{H}_{disp}^*)\}\, r^2 d\Omega \tag{2.150}$$

El producto de los campos incidentes resulta imaginario puro, de manera que no aporta a la potencia absorbida. Los otros productos que aparecen en la expresión (2.150) son, por un lado el producto de los campos dispersados, cuya integral resulta igual a (2.148) pero ahora con un signo negativo, ya que corresponde a la potencia entrante en la superficie, y por otro lado los productos cruzados entre campos incidentes y dispersados. En los cálculos aparece de nuevo el Wronskiano entre las j_ℓ y las y_ℓ de Bessel con el que se simplifican algunas expresiones para obtener:

$$P_{abs} = -\frac{c}{8\pi}\sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}}\frac{1}{k_3^2}\sum_{\ell,m} Re\{a_{\ell m}^{0E}\, a_{\ell m}^{+E*} + a_{\ell m}^{0H}\, a_{\ell m}^{+H*}\} + |a_{\ell m}^{+E}|^2 + |a_{\ell m}^{+H}|^2 \tag{2.151}$$

Luego, utilizando (2.141), se tiene para la potencia exinguida:

$$P_{ext} = -\frac{c}{8\pi}\sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}}\frac{1}{k_3^2}\sum_{\ell,m} Re\{a_{\ell m}^{0E}\, a_{\ell m}^{+E*} + a_{\ell m}^{0H}\, a_{\ell m}^{+H*}\} \tag{2.152}$$

La potencia que lleva la onda plana incidente (2.62) y (2.79) se puede calcular a partir del vector de Poynting de esta onda, y resulta:

$$\mathbf{S} = \sqrt{\frac{\varepsilon_3}{\mu_3}}\, E_0^2\, \hat{\mathbf{z}} \tag{2.153}$$

2.7.1. Energía disipada en las capas de grafeno

En cada una de las capas de grafeno se disipa energía por efecto Joule. La potencia disipada en cada capa viene dada por:

$$P = \int_{4\pi} \mathbf{J}\cdot\mathbf{E}\, R_i^2 d\Omega = \int_{4\pi} \sigma E^2\, R_i^2 d\Omega \tag{2.154}$$

Donde R_i se refiere al radio de la capa i = 1,2. En esta cuenta entra la parte del campo eléctrico tangencial a la superficie de la esfera $\mathbf{E}_{\|}$.
Tenemos:

$$|\mathbf{E}_{\|}| = |\hat{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{E}| \tag{2.155}$$

Donde el lado derecho tiene la forma (2.143), de manera que para la potencia disipada en la superficie de una capa esférica obtenemos:

$$P_{sup} = \sum_{\ell,m} \frac{1}{(kRi)^2}\{[(kRi) f_\ell(kRi)]'\}^2 R_i^2 |a_{\ell m}^E|^2 + f_\ell^2(kR_i) R_i^2 |a_{\ell m}^H|^2 \tag{2.156}$$

Hasta aquí nos hemos concentrado en estudiar de forma teórica rigurosa la dispersión dada por dos esferas concéntricas de grafeno sobre las que incide una onda plana. A partir de aquí presentaremos algunos resultados numéricos de interés.

Capítulo 3

Herramienta numérica

Para la evaluación numérica de los campos, secciones eficaces, etc. se desarrolló un programa en lenguaje Python. Con el objetivo de verificar el correcto funcionamiento del programa se reprodujeron resultados hallados en la bibliografía sobre el tema. [XFS14, TCM15, BYZ15]. Todos los programas utilizados para el desarrollo del código cumplen con los requerimientos de software libre [Hun07].

Verificamos el correcto funcionamiento del código y la convergencia de los cálculos comparando los resultados obtenidos con algunos hallados en la literatura, estos resultados involucran un núcleo dieléctrico y con un recubrimiento de grafeno.

3.1. Verificación del funcionamiento del código

- Esfera dieléctrica sin recubrimiento con distintos valores de índice de refracción [XFS14]: La primera verificación se llevó a cabo considerando una esfera dieléctrica de permitividad uniforme sin grafeno y variando el índice de refracción de ésta con los valores dados en [XFS14]. En la figura (3.1) se pueden ver los resultados obtenidos para las secciones eficaces de dispersión divididas por la sección eficaz geométrica, que es igual a $2\pi R^2$ en función de un parámetro de tamaño igual al número de onda por el radio de la esfera $k_0 R$. En este caso se dejó fijo el radio de la esfera en 10 nm y se varió la frecuencia de la onda incidente. Los valores obtenidos están en perfecto acuerdo con

los dados en la bibliografía. Se puede ver en la figura (3.1) (c), que cuando el índice de refracción se vuelve muy grande, la sección eficaz tiende a un valor que es el doble de la sección eficaz geométrica, esta aparente paradoja tiene su origen en la difracción que ocurre en los bordes de esfera [BH98] y es un resultado conocido.

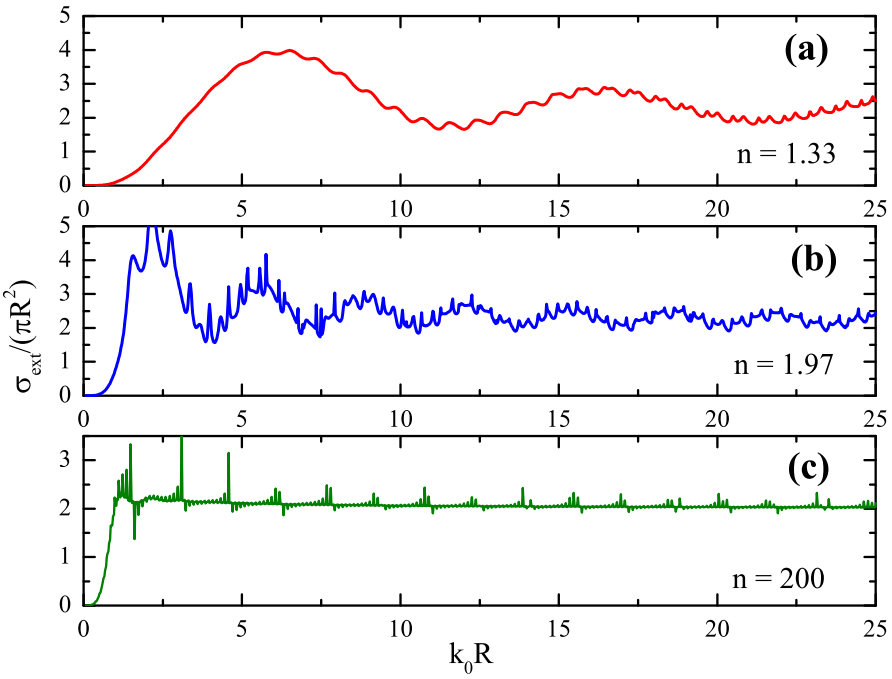

Figura 3.1: Gráficos correspondientes a la Figura 2 de [XFS14] donde se representa la sección eficaz de dispersión dividida por la sección eficaz geométrica para una esfera de material dieléctrico con distintos valores del índice de refracción en función del factor de tamaño kR. Cálculo realizado con el programa desarrollado para este trabajo

- Esfera dieléctrica con recubrimiento de grafeno [TCM15]:

  Con el fin de comparar con algunos de los resultados del artículo [TCM15] para una esfera de material dieléctrico recubierta de grafeno dentro del régimen cuasi-estacionario (longitud de onda mucho mayor que las dimensiones de la esfera), derivamos una expresión asintótica del coeficiente de transmisión del modo magnético, $T^H_{\ell m}$ utilizando las expresiones asintóticas de las funciones de Bessel para argumento pequeño.

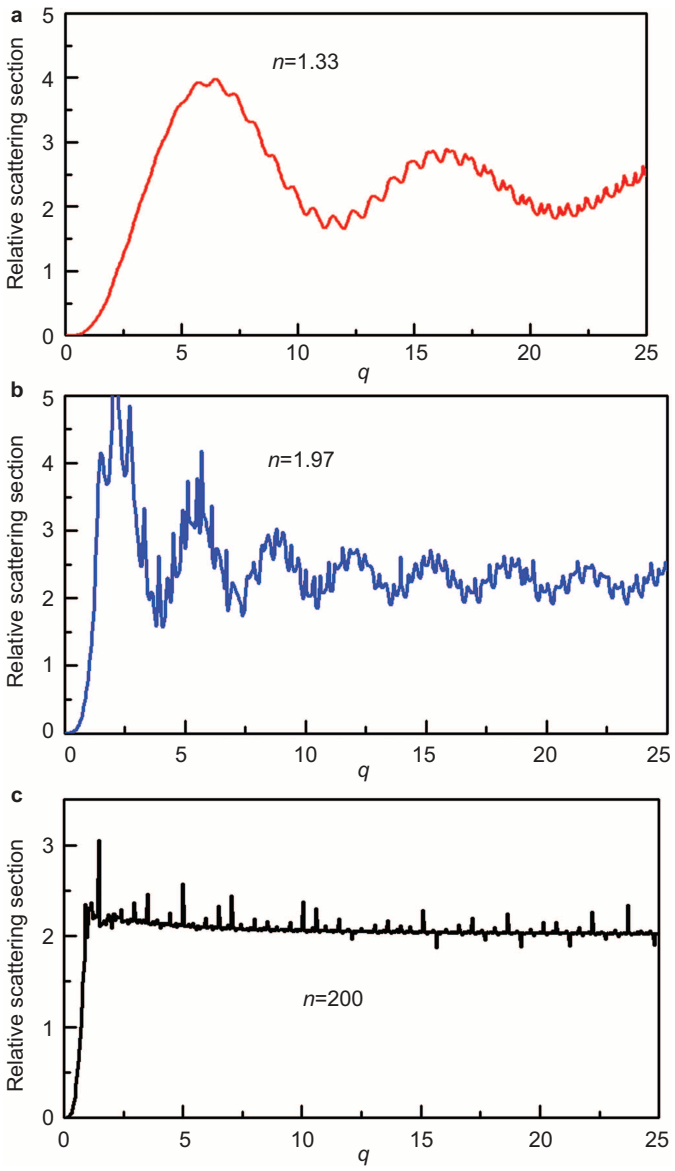

Figura 3.2: Tomado de [XFS14], se corresponde con el gráfico de la figura 3.1

$$j_\ell(x) \longrightarrow \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!} \tag{3.1}$$

$$y_\ell(x) \longrightarrow \frac{-(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}} \tag{3.2}$$

$$h_\ell(x) \longrightarrow \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!} - \frac{i(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}} \tag{3.3}$$

Vamos a utilizar R_2 para el radio de esta esfera, de manera que $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ y $g_1(\omega) = 0$. Entonces, el coeficiente $A^H_{\ell m}$ definido en (2.127) resulta cero y se recupera la forma del coeficiente de transmisión de Mie pero con una capa conductora, de la cual da cuenta $g_2(\omega)$.

Para una capa de grafeno de radio R_2 en el límite cuasi-estacionario se obtiene:

$$T^H_{\ell m} = \frac{i(\ell+1)\left[-\varepsilon_3 + \varepsilon_1 + (\ell+1)g_2(\omega)\right] k_3^{2\ell+1} R_2^{2\ell+1}}{(2\ell-1)!!(2\ell+1)!!\left[(\ell+1)\varepsilon_3 + \ell\varepsilon_1 + \ell(\ell+1)g_2(\omega)\right]} \tag{3.4}$$

A partir de esta expresión asintótica se puede calcular la polarizabilidad multipolar [TCM15] dada por:

$$\alpha_\ell = -4\pi i \frac{\ell[(2\ell+1)!!]^2}{(\ell+1)(2\ell+1)} \lim_{x_0 \to 0} \frac{T^H_{\ell m}}{k_3^{2\ell+1}} \tag{3.5}$$

Se tiene entonces:

$$\alpha_\ell = 4\pi R_2^{2\ell+1} \frac{\ell[-\varepsilon_3 + \varepsilon_1 + (\ell+1)g_2(\omega)]}{[(\ell+1)\varepsilon_3 + \ell\varepsilon_1 + \ell(\ell+1)g_2(\omega)]} \tag{3.6}$$

En el régimen cuasi-estático, la condición de resonancia de los modos plasmónicos viene dada por los polos de α_1. Se compara el resultado obtenido en la bibliografía utilizando la aproximación $\sigma_{ext} \approx k_{ext} Im(\alpha_1) + (6pi)^{-1} k_{ext}^4 |\alpha_1|^2$ [TCM15] con el resultado obtenido usando el código desarrollado. Las figuras 3.3 y 3.4 muestran las eficiencias de extinción obtenidas en el presente trabajo y en el artículo mencionado respectivamente.

- Esfera dieléctrica con recubrimiento de grafeno [BYZ15]:
  En el artículo [BYZ15] se analiza la absorción de ondas electromagnéticas por esferas de diferentes materiales dieléctricos recubiertas de grafeno. Allí se estudia absorción no sólo para una esfera sino para dos esferas separadas y para conjuntos de esferas. Para verificar el funcionamiento del código desarrollado para este trabajo, reprodujimos los resultados correspondientes a la eficiencia de absorción de una esfera dieléctrica recubierta con grafeno, cuando se varían diferentes parametros.

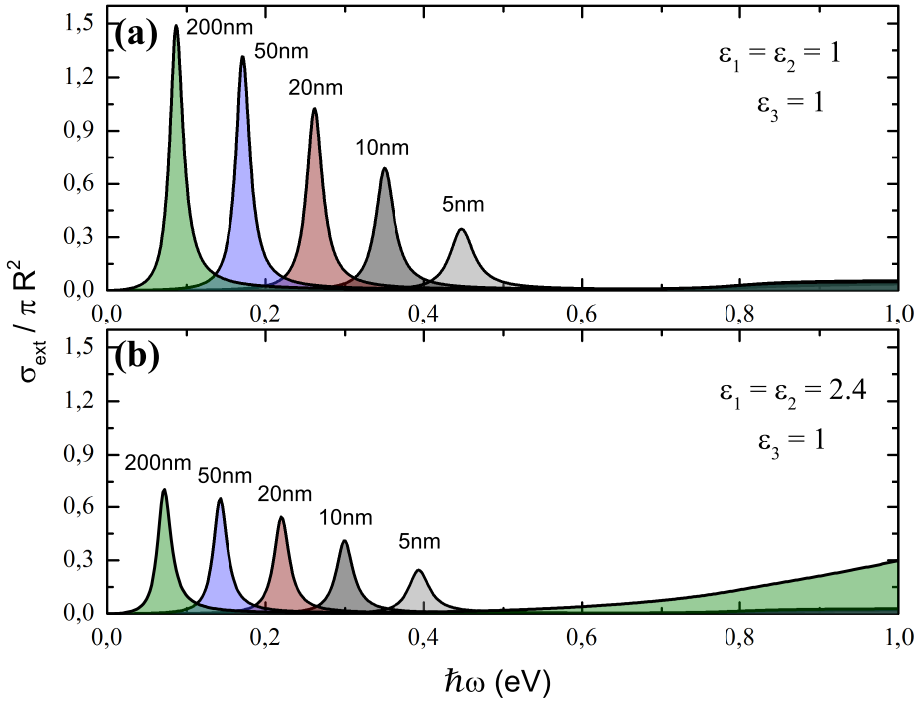

Figura 3.3: Sección eficaz de extinción divida por la sección eficaz geométrica para una capa esférica de grafeno de diferentes radios, correspondientes a los de la Fig.3 de [TCM15], con medio interior de índices n=1 (a) y n=2,4 (b). Calculado utilizando el código desarrollado.

El código Python desarrollado calcula las secciones eficaces y eficiencias de dispersión y extinción, a partir de las expresiones (2.148) y (2.152), calculadas utilizando los coeficientes de transmisión, y luego se obtiene la potencia absorbida utilizando (2.141). Los resultados obtenidos utilizando el programa desarrollado se pueden ver en la 3.5, estos resultados fueron comparados con los obtenidos en [BYZ15] que utiliza una aproximación de temperatura cero para bajas temperaturas que se pueden ver en la figura 3.6.

Luego de haber demostrado que los resultados obtenidos con las herramientas desarrolladas en esta tesis concuerdan de manera aceptable con los resultados disponibles en la literatura, en el captulo siguiente obtendremos algunos resultados novedosos para arreglos

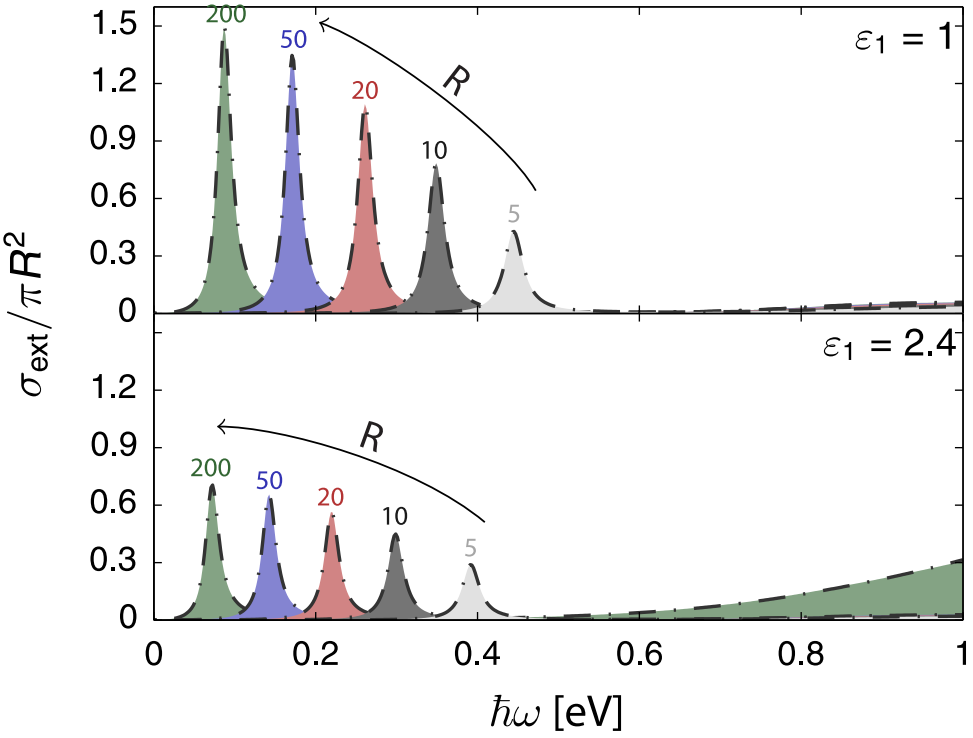

Figura 3.4: Tomado de [TCM15], se corresponde con el cálculo de la figura 3.3 utilizando la aproximación cuasiestacionaria mencionada.

utilizando una y dos capas de grafenos concéntricas.

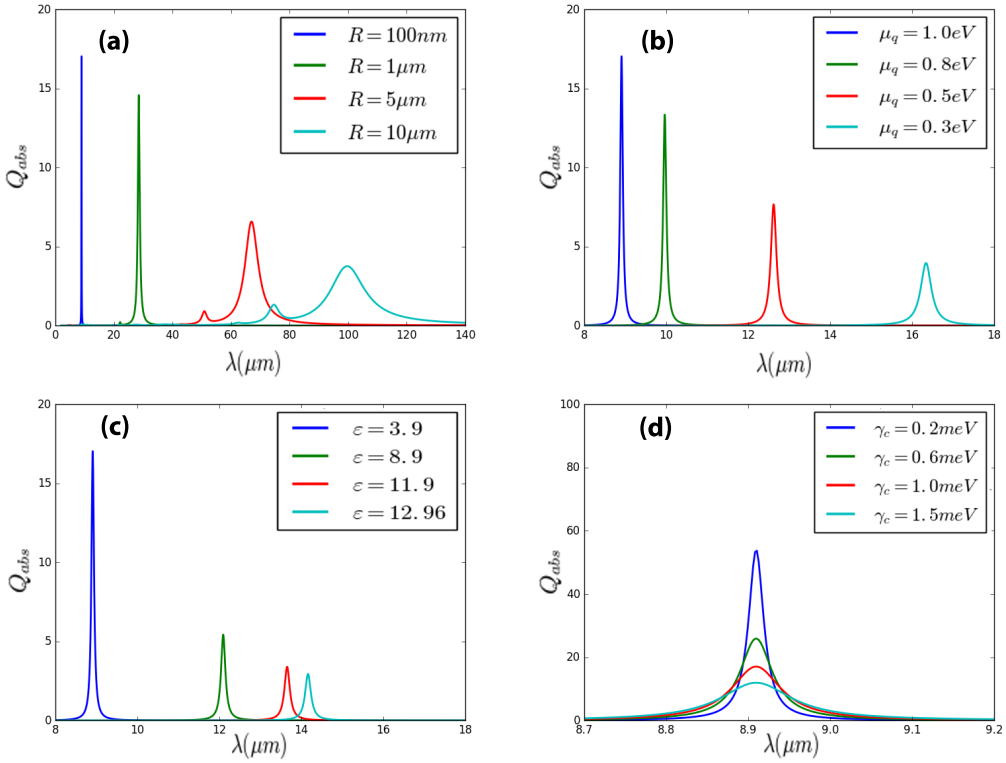

Figura 3.5: Reproducción de los resultados mostrados en la figura 2 de [BYZ15]. En la subfigura (a) se tiene la eficiencia de absorción para una esfera de constante dieléctrica $\varepsilon =$ 3,9 recubierta con grafeno de potencial químico $\mu_q = 1{,}0\,\text{eV}$ y una frecuencia de colisiones $\gamma_c = 1\,\text{meV}$ para distintos radius de la esfera. En (b) se utiliza un radio de 100 nm, $\gamma_c =$ 1 meV, $\varepsilon =$ 3,9 y se varía el potencial químico. La subfigura (c) muestra los resultados variando la constante dieléctrica para $R = 100\,\text{nm}$, $\mu_q = 1\,\text{eV}$ y $\gamma_c = 1\,\text{meV}$. En (d) se puede ver cómo varía la absorción cuando cambia la frecuencia de colisiones, dejando fijo el radio en 100 nm, el potencial químico en 1,0 eV y la constante dieléctrica en 3,9

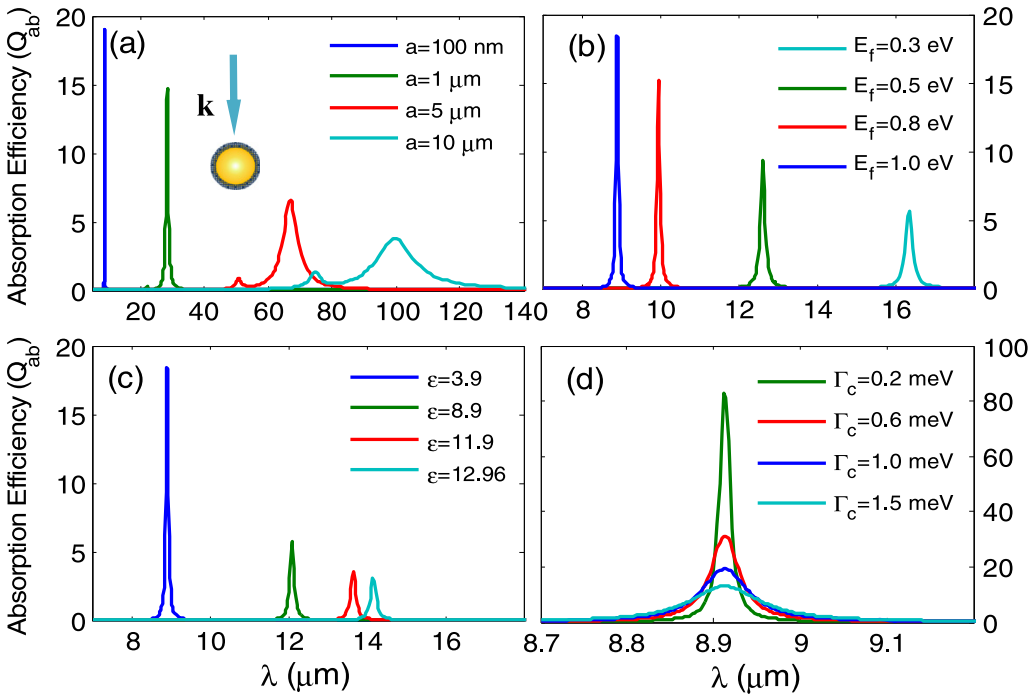

Figura 3.6: Figura tomada de [BYZ15] con los resultados obtenidos por Yang et al. correspondientes a la figura 3.5

Capítulo 4

Resultados

En las secciones 2.5 y 2.6 hemos hallado las expresiones de los campos electromagnéticos dispersados por dos esferas concéntricas de grafeno sobre las que incide una onda plana monocromática. Estas expresiones son funciones de la frecuencia incidente, de la geometría de la configuración, y de las características constitutivas de los medios así como de las superficies de grafeno.

En esta sección presentamos resultados numéricos relacionados con las características esenciales de los modos plasmónicos en los sistemas núcleo-recubrimiento (core-shell). Estos sistemas resultan de interés debido a que ofrecen nuevos grados de libertad para sintonizar las resonancias plasmónicas que surgen de la hibridización de modos plasmónicos en una sola capa. Por este motivo, este capitulo comienza con resultados obtenidos con una sola capa de grafeno.

4.1. Resultados utilizando una capa esférica

En la figura 4.1 se grafica la sección eficaz de dispersión para una esfera metálica de radio $R = 50\,\text{nm}$ recubierta de grafeno e inmersa en vacío sobre la que incide una onda plana, en función de la frecuencia incidente.

La permitividad eléctrica interior $\varepsilon_1(\omega)$ está dada por la ecuación (4.1) con $\varepsilon_\infty = 1$, $\gamma_m = 0{,}01\,\text{eV}$ y diferentes valores de frecuencia de plasma (ω_p : $0{,}5\,\text{eV}, 0{,}7\,\text{eV}$ y $0{,}9\,\text{eV}$), mientras que el valor de la conductividad superficial $\sigma(\omega)$ correspondiente al grafeno se obtuvo de la expresión de Kubo (1.7) con $T = 300\,\text{K}$, $\gamma_c = 0{,}1\,\text{meV}$ y $\mu_c = 0{,}5\,\text{eV}$.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_D)} \tag{4.1}$$

Se muestra también la sección eficaz de dispersión para las mismas esferas metálicas pero desnudas, así como para una esfera de grafeno vacía en su interior (curva negra, donde $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \mu_1 = \mu_2 = 1$).

Las frecuencias de excitación están en el rango entre 24 THz (longitud de onda incidente 12400 nm) y 170 THz (1770 nm). Las curvas de la figura muestran que con grafeno las resonancias se corren hacia el azul en comparación con las resonancias de las esferas desnudas. Esto es consistente con el hecho de que el recubrimiento de grafeno induce un aumento en la densidad de portadores de carga en la superficie metálica.

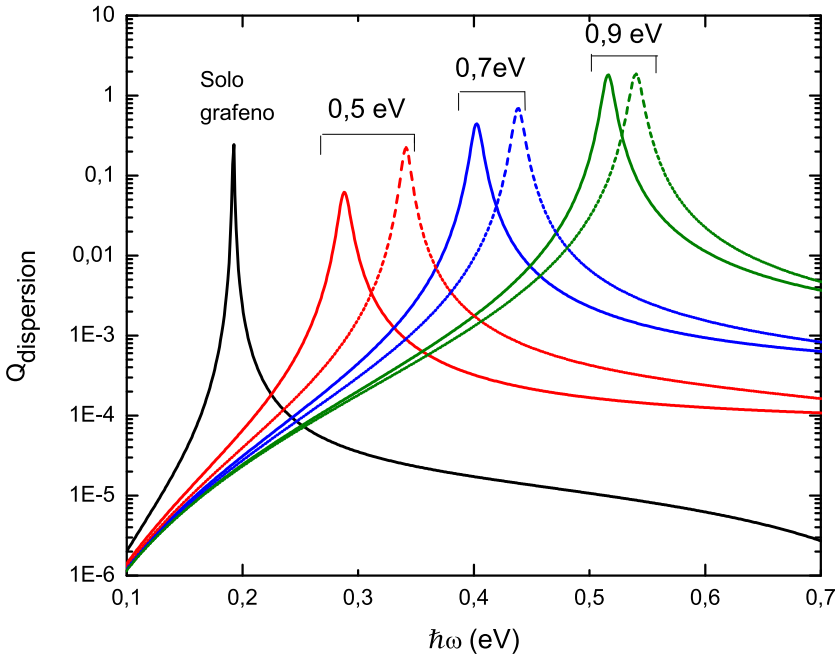

Figura 4.1: Frecuencias de resonancia plasmónica para una capa esférica de grafeno y esferas metálicas de distinto valor de frecuencia del plasma con y sin recubrimiento de grafeno.

La figura 4.2 presenta la sección eficaz de dispersión para una esfera metálica de radio

$R = 50\,\text{nm}$ recubierta de grafeno ($\omega_p = 0{,}5\,\text{eV}$) e inmersa en vacío sobre la que incide una onda plana, para diferentes valores del potencial químico (μ_c : $0{,}3\,\text{eV}, 0{,}5\,\text{eV}, 0{,}8\,\text{eV}$ y $1{,}1\,\text{eV}$). Esto ilustra la capacidad de ajuste de las resonancias, demostrando que estas se pueden controlar con la ayuda de un voltaje de compuerta, el cual determina el valor del potencial químico.

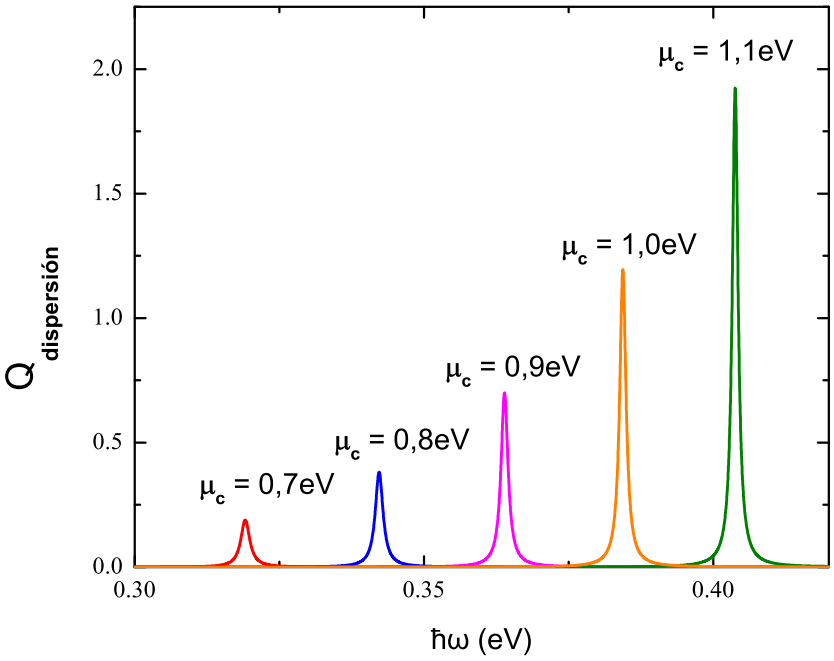

Figura 4.2: Sección eficaz de dispersión dividida por la sección eficaz geométrica para una capa esférica de grafeno en aire y diferentes valores del potencial químico μ_c.

La figura 4.3 muestra las secciones eficaces de extinción correspondientes a una esfera de 50 nm de radio y a otra de 200 nm; ambas de permitividad $\varepsilon_1 = 1$ y recubiertas de grafeno (con $\mu_q = 0{,}9\,\text{eV}$). Como es de esperarse, debido al aumento de las dimensiones de las partícula, la frecuencia de resonancia se corre a frecuencias menores para una esfera de radio mayor.

Se puede apreciar que cuanto más parecidos son los radios de las esferas individuales, más cercanas son las curvas de resonancia, y esto es lo que se observa claramente en la figura

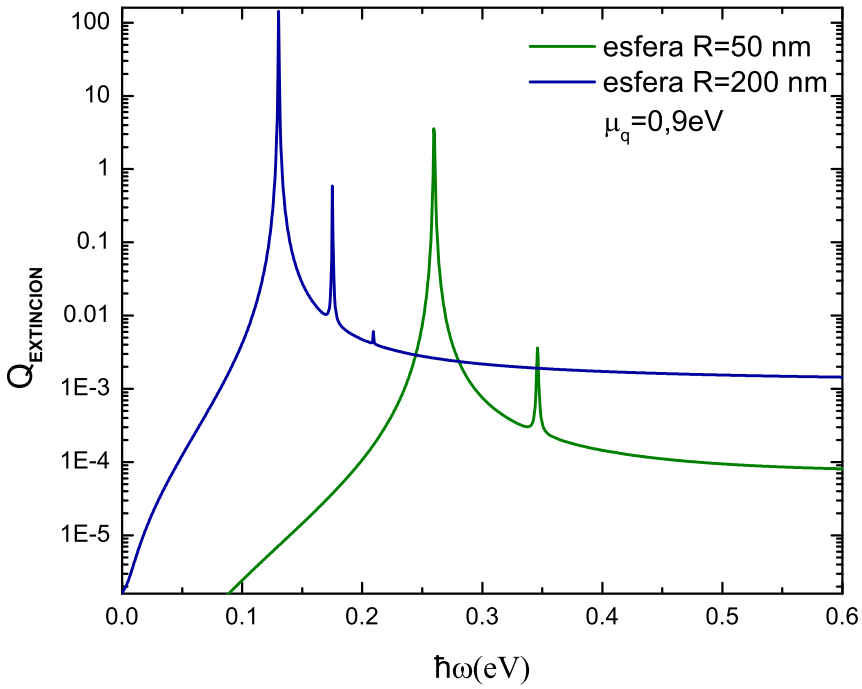

Figura 4.3: Sección eficaz de extinción correspondiente a una esfera recubierta de grafeno de radio 50 nm (verde), otra de 200 nm (azul), en ambos casos con permitividades interior y exterior igual a uno y conductividad dada por un potencial químico $\mu_c = 0{,}9\,\text{eV}$.

4.4. En la misma se presentan las curvas de extinción como las de la figura 4.3, pero esta vez para esferas de radios parecidos (una de radio 198 nm y la otra de 200 nm). Observar que las curvas son practicamente coincidentes.

Finalmente, se realizaron gráficas del módulo del campo eléctrico sobre la superficie para una superficie esférica de grafeno autosostenida, esto es, con aire o vacío tanto en el espacio interior como exterior a la superficie. La eficiencia de extinción para radio $R = 1000\,\text{nm}$, con un potencial químico $\mu_c = 1{,}3\,\text{eV}$, una frecuencia de colisiones $\gamma_c = 0{,}0001\,\text{eV}$ y a una temperatura de 300 K puede verse en la figura 4.5. Allí aparecen una serie de picos que corresponden a resonancias de diferentes modos multipolares, donde el orden del multipolo crece a medida que aumenta la frecuencia de excitación y se aprecia que la intensidad de

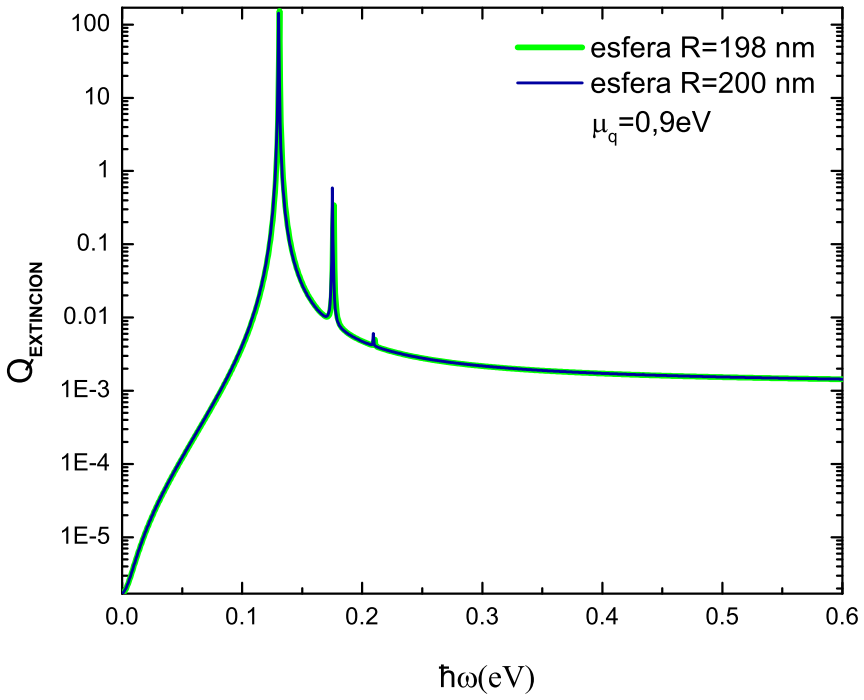

Figura 4.4: Sección eficaz de extinción correspondiente a una esfera recubierta de grafeno de radio 198 nm (verde), otra de 200 nm (azul) con conductividad dada por un potencial químico $\mu_c = 0{,}9$ eV, las permitividades en los espacios interior y exterior son iguales a 1.

los picos decrece a medida que aumenta el orden.

La figura 4.6 muestra el módulo del campo eléctrico a un radio $1{,}01R$ donde R es el radio de la esfera, esto es, en el espacio exterior a la superficie, justo por encima de ella. La incidencia es en la dirección $\hat{\mathbf{z}}$ y el campo eléctrico está polarizado en la dirección $\hat{\mathbf{x}}$. Se distinguen en los diferentes gráficos los polos (en rojo) donde el campo es más intenso. Debido a que la intesidad de la resonancia disminuye con el orden multipolar, a medida que aumenta este orden se vuelve más difícil identificar los polos, en el caso octupolar algunos polos no llegan a resolverse.

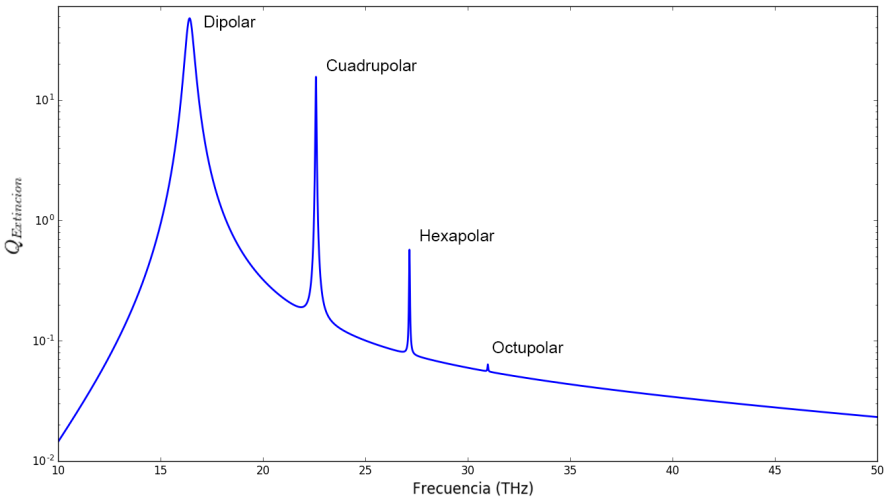

Figura 4.5: Eficiencia de extinción para una capa esférica de grafeno autosostenida. Se pueden apreciar los picos correspondientes a las excitaciones de distintos multipolos. El radio de la esfera es $1\,\mu$m y para su conductividad se utilizó un potencial químico $\mu_c = 1{,}3\,$eV, una frecuencia de colisiones $\gamma_c = 0{,}0001\,$eV y una temperatura de $300\,$K

4.2. Resultados utilizando dos capas esféricas concéntricas

Para ver la interacción entre dos capas de grafeno se presentan en la figura 4.7 las curvas de la figura 4.3 junto con la curva correspondiente a la sección eficaz de extinción para dos superficies esféricas juntas. En este caso se observa claramente que los picos de resonancia dados por las dos cáscaras de grafeno concéntricas juntas corresponden a la unión de los picos de ambas esferas individuales.

Sin embargo, cuando se observa la interacción entre dos capas de grafeno muy cercanas (como es el caso de los radios de la figura 4.4) el efecto difiere del presentado en la figura 4.9 para radios más alejados. Aquí la curva para la sección eficaz de extinción de dos cáscaras de grafeno de radios parecidos está claramente corrida respecto a las curvas individuales (ver figura 4.8).

La interpretación de lo observado en la figura 4.8 es que al estar muy juntas ambas superficies de grafeno, el efecto en la sección eficaz es similar al que produce una única superficie, pero con una conductividad mayor a la de las dos capas individuales. Este resultado

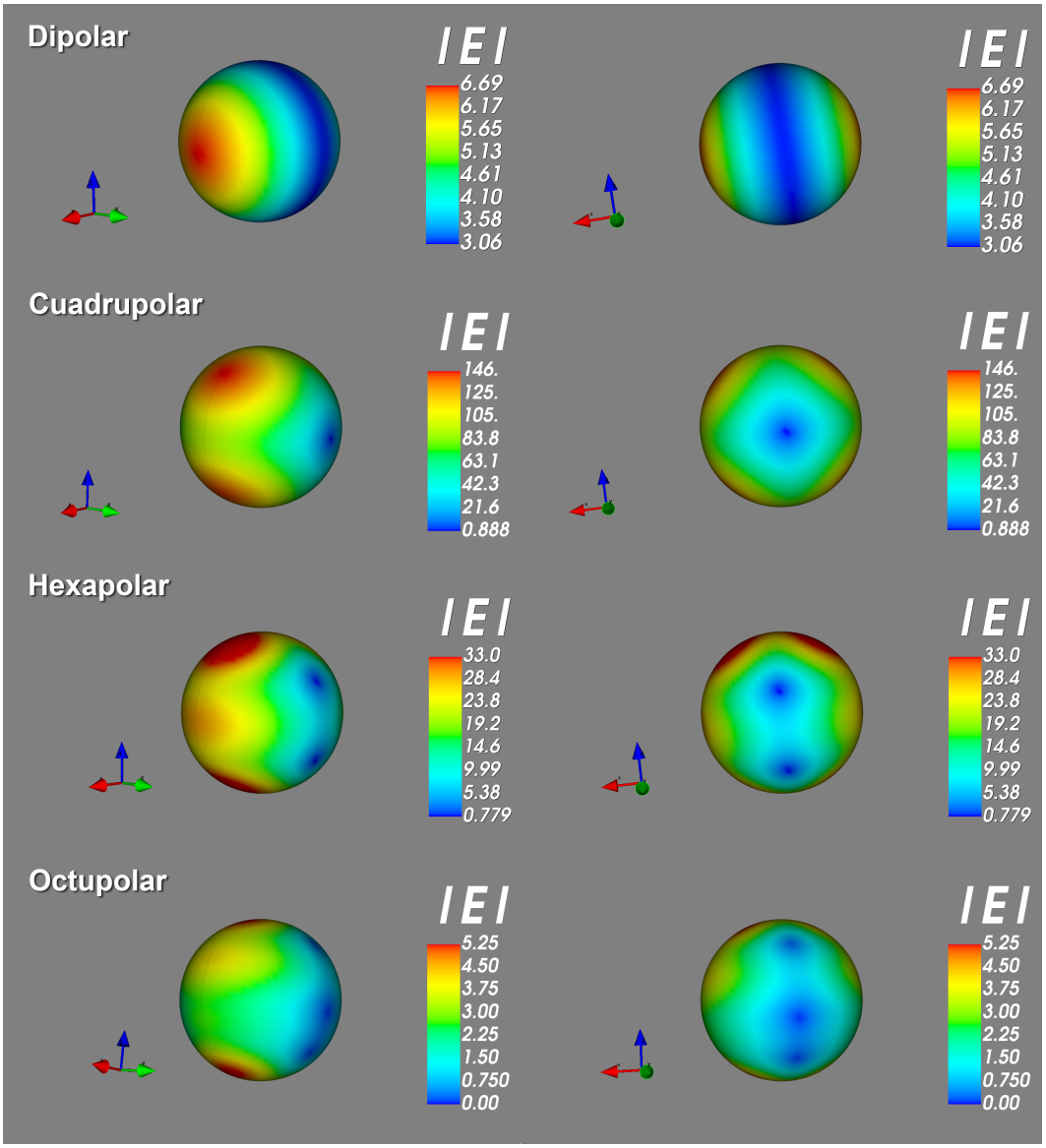

Figura 4.6: Intensidad del campo eléctrico a un radio de 1,01 veces el radio de la esfera. El gráfico de cada resonancia aparece en dos orientaciones diferentes. En el sistema de ejes, el eje azul representa la dirección $\hat{\mathbf{z}}$ a lo largo de la cual incide la onda plana, el eje rojo representa la dirección $\hat{\mathbf{x}}$ que contiene la polarización del campo y el eje verde es la dirección $\hat{\mathbf{y}}$. Se puede ver que en la resonancia dipolar el campo tiene dos polos que son máximos de intensidad, en el caso cuadrupolar cuatro, etc. En la resonancia octupolar los polos se distinguen con mayor dificultad debido a que la intensidad de la excitación es mucho menor que en los otros casos y que la presencia de la cola de otras resonancia desdibuja la distribución.

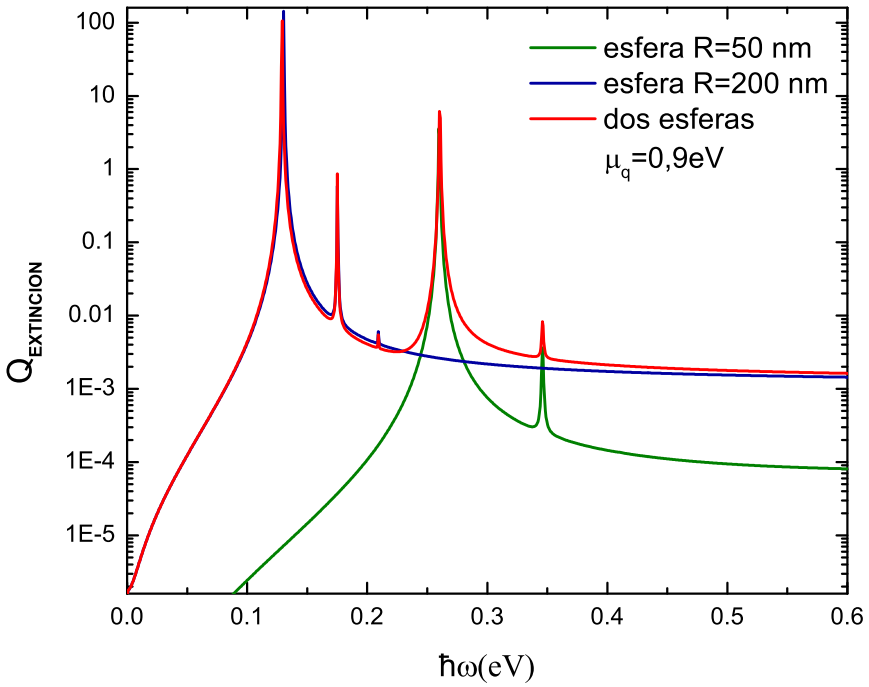

Figura 4.7: Sección eficaz de extinción correspondiente a una esfera recubierta de grafeno de radio 50 nm (verde), otra de 200 nm (azul) con conductividad dada por un potencial químico $\mu_c = 0{,}9\,\text{eV}$, y sección eficaz de extinción para ambas esferas juntas (rojo) (con permitividades en los medios $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 1$).

es consistente con el análisis de dos capas que se hace en la sección III de ([DSO13]).

Para constatar esto se presenta en la figura 4.9 la curva de la sección eficaz de las mismas dos esferas juntas de la figura 4.8, las que tienen radios 198 nm y 200 nm, ambas de grafeno con conductividad dada por un $\mu_q = 0{,}9\,\text{eV}$, junto con la curva correspondiente a una única esfera (de radio 200 nm), pero en este caso con conductividad correspondiente a un $\mu_q = 1{,}8\,\text{eV}$.

En la figura 4.10 se presentan curvas de extinción para dos esferas concéntricas, de grafeno, de $R_1 = 190\,\text{nm}$ y $R_2 = 200\,\text{nm}$, ambas con $\mu_q = 0{,}9\,\text{eV}$, con aire en la región interior y exterior ($\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 1$), pero para varios valores de permeabilidad en la zona intermedia, donde se dejó fija la parte real de la misma ($Re(\varepsilon_2) = 1{,}5$) y se varió la parte

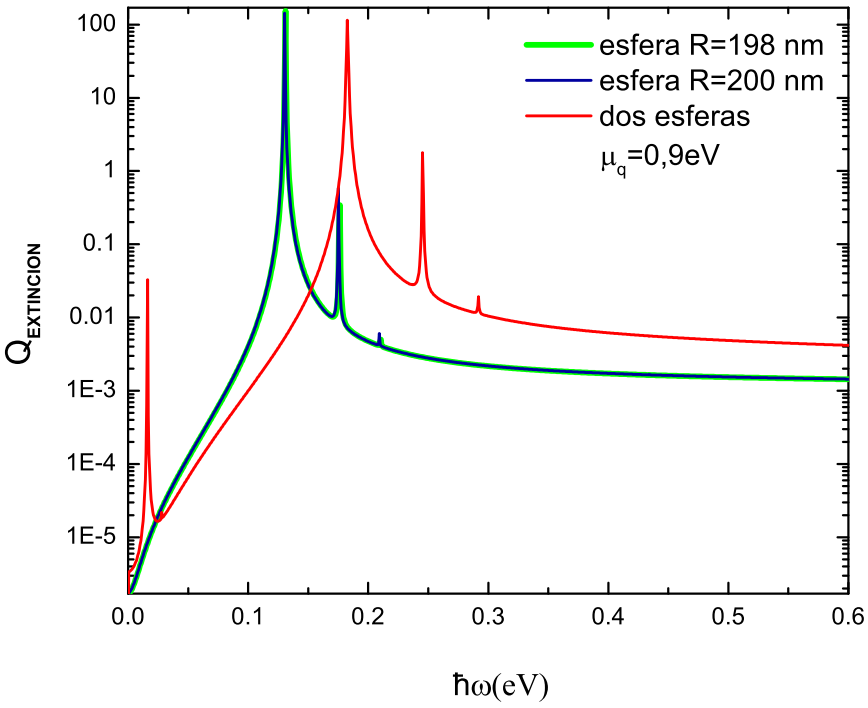

Figura 4.8: Sección eficaz de extinción correspondiente a una esfera recubierta de grafeno de radio 198 nm (verde), otra de 200 nm (azul) con conductividad dada por un potencial químico $\mu_c = 0{,}9\,\text{eV}$, y sección eficaz de extinción para ambas esferas juntas (con permitividades en los medios $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 1$) (rojo).

imaginaria ($Im(\varepsilon_2)$: 0, 0,01, 0,05 y 0,15).

La parte imaginaria de ε_2 da la pérdida de energía por absorción en la correspondiente zona; esto se observa en que al aumentar $Im(\varepsilon_2)$ se van ensanchando los picos de resonancia, pero sin cambiar la posición de los mismos.

4.3. Estudio de los campos cercanos

Para complementar las curvas de extinción que se dan para dos cáscaras esféricas interactuando, se presentan en la figura 4.12 los campos cercanos (módulo de campo eléctrico) correspondientes a dos esferas de grafeno de radios $R_1 = 0{,}9\,\mu\text{m}$ y $R_2 = 1\,\mu\text{m}$, ambas con

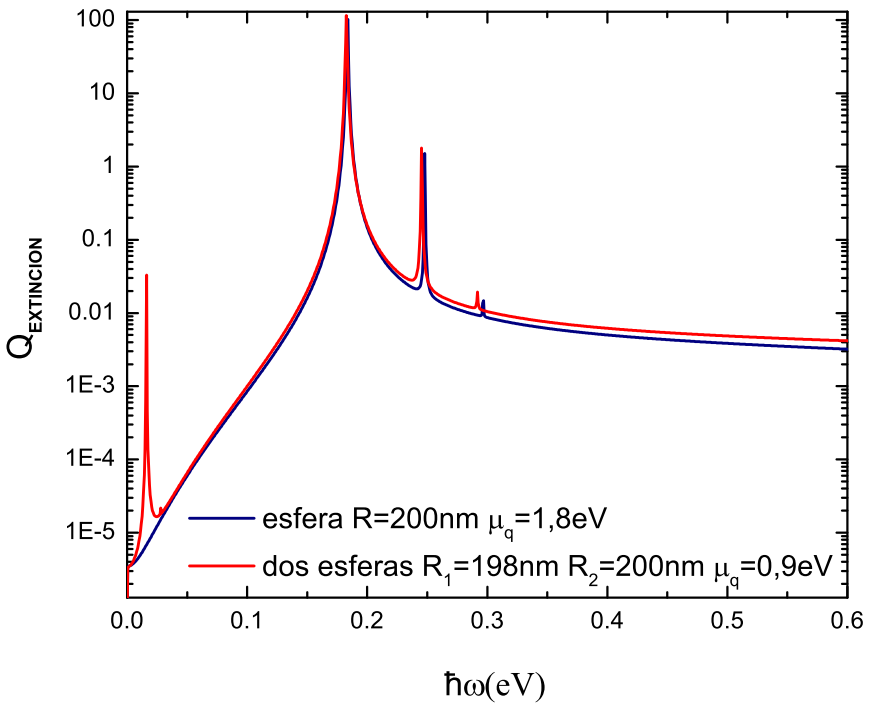

Figura 4.9: Sección eficaz de extinción correspondiente a dos esferas recubiertas de grafeno juntas de radios 198 nm and 200 nm (rojo) con conductividad dada por un potencial químico $\mu_c = 0{,}9\,\text{eV}$ (con permitividades en los medios $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 1$) y sección eficaz de extinción para una única esfera de radio 200 nm con potencial químico $\mu_c = 1{,}8\,\text{eV}$ (azul).

$\mu_q = 1\,\text{eV}$, e inmersas en aire ($\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 1$). En las figuras presentadas la onda excitadora incide desde abajo y en cada caso la excitación es a la frecuencia de resonancia correspondiente al pico indicado en la figura 4.11 (5,85 THz (a), 9,89 THz (b), 19,9 THz (c), 26,95 THz (d), 31,76 THz (e) y 35,5 THz (f)). En los gráficos se incorporaron versores indicando la componente del campo paralela al plano del corte.

Claramente las simetrías que presentan las figuras (a) y (c) corresponden a excitaciones dipolares, (b) y (d) a cuadrupolares, mientras que (e) es hexapolar. Hagamos notar que las dipolares presentan un campo uniforme en el interior. Por otra parte, (a) y (b) presentan sus valores máximos de intensidad en la zona intermedia mientras que (c) y (d) lo hacen en la zona externa. El caso de (e) es mas complejo aunque puede decirse que la mayor parte

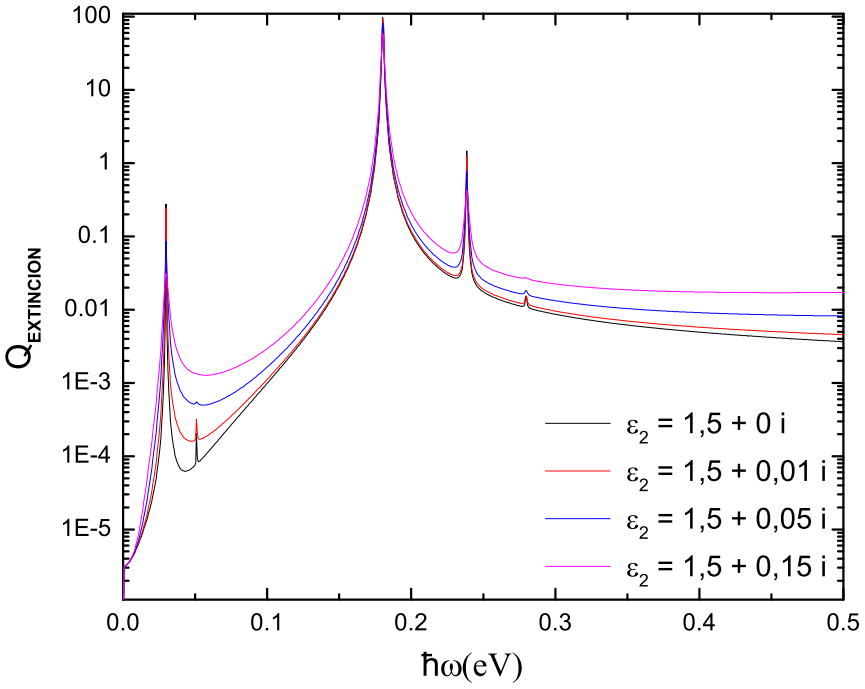

Figura 4.10: Eficiencia de extinción para una partícula con núcleo de aire o vacío y dos capas de grafeno separadas por un medio con permitividad compleja. En las diferentes curvas se varía la parte imaginaria de la permitividad. Se puede apreciar que el aumento de esta parte imaginaria, que al ser positiva representa absorción en el medio, tiene el efecto de ensanchar los los picos de resonancia sin alterar sus posiciones.

del máximo de intensidad se da en la zona interna a la esfera mas chica.

Por último, observar que la escala de intensidad no es la misma en cada figura, disminuyendo el valor máximo al aumentar el multipolo, y concordando aproximadamente con la altura relativa entre picos de la figura 4.11.

De forma similar a la anterior, en la figura 4.13 se muestran los campos cercanos correspondientes a los picos dipolares presentados en la figura 4.9. El caso (a) es para una única esfera de radio $R = 200\,\text{nm}$, de grafeno, donde la conductividad viene dada por un potencial químico $\mu_q = 1{,}8\,\text{eV}$, y el caso (b) es para dos esferas de radios $R_1 = 198\,\text{nm}$ y $R_2 = 200\,\text{nm}$, donde el grafeno tiene en ambas capas una conductividad dada por $\mu_q = 0{,}9\,\text{eV}$.

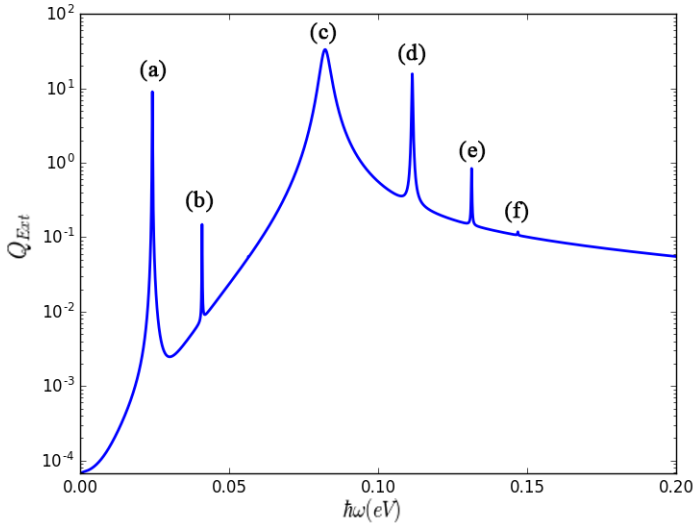

Figura 4.11: Eficiencia de extinción para dos superficies esféricas de grafeno de radios $R_1 = 0{,}9\,\mu$m y $R_2 = 1\,\mu$m con un potencial químico $\mu_q = 1\,$eV y $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 1$. Los picos que pueden verse, (a), (b), (c), (d), (e) y (f), representan resonancias correspondientes a diferentes excitaciones multipolares.

Es clara la similitud en ambos casos, aunque hay que hacer notar que la escala de valores de intensidad no es la misma.

La figura 4.14 muestra la sección eficaz de dispersión en función de la frecuencia de la onda incidente para dos esferas recubiertas de grafeno de radios $R_1 = 195\,$nm y $R_2 = 200\,$nm, para cuatro valores diferentes de potencial químico en las capas de grafeno. En todos los casos los tres medios adyacentes son aire. Se puede observar que la disminución del potencial químico implica un corrimiento al rojo de la frecuencia de resonancia.

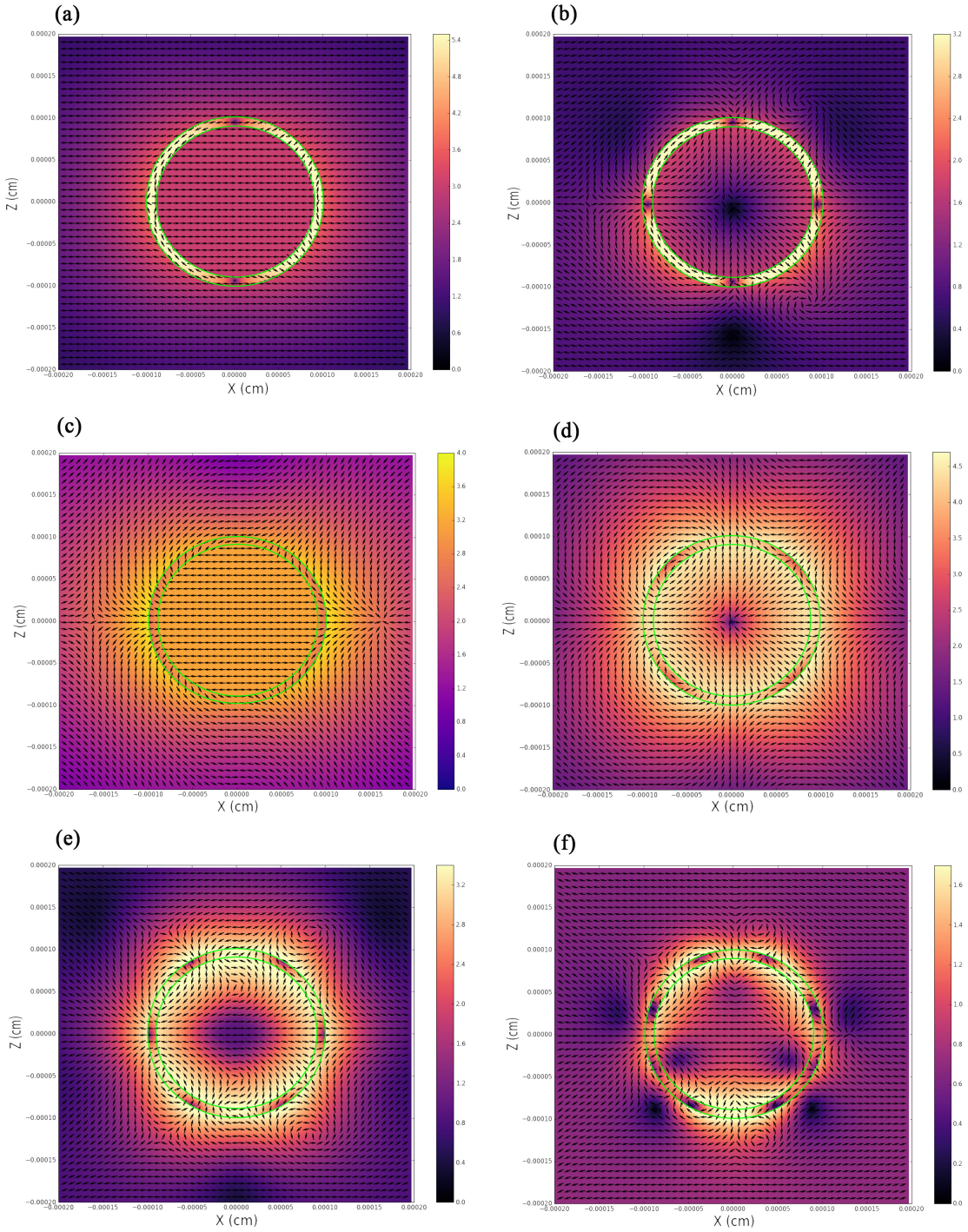

Figura 4.12: Mapa de campo eléctrico cercano ($|E|$) para los cinco multipolos indicados en la figura 4.11 excitados desde abajo con una onda plana monocromática, de frecuencia correspondiente al modo excitado. Las superficies esféricas se indican en verde. Se incluyen vectores indicando la componente del campo contenida en el plano (y,z). En la versión electrónica se sugiere ampliar la figura para verla con mayor detalle.

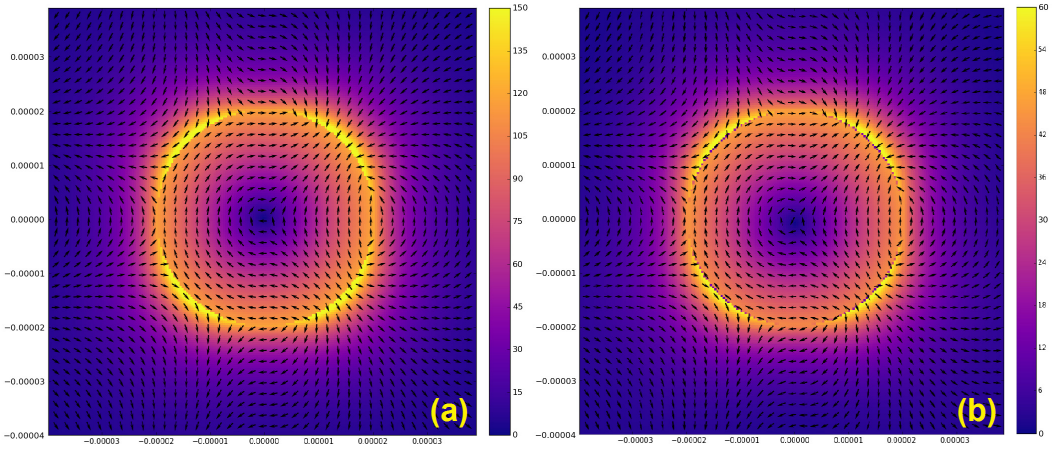

Figura 4.13: Intensidad de campo eléctrico cercano para: (a) Una capa esférica de radio de 200 nm utilizando un potencial químico de 1,8 eV y (b) Dos capas esféricas de radios de 198 nm y 200 nm utilizando un potencial químico de0,9 eV. En la versión electrónica se sugiere ampliar la figura para verla con mayor detalle.

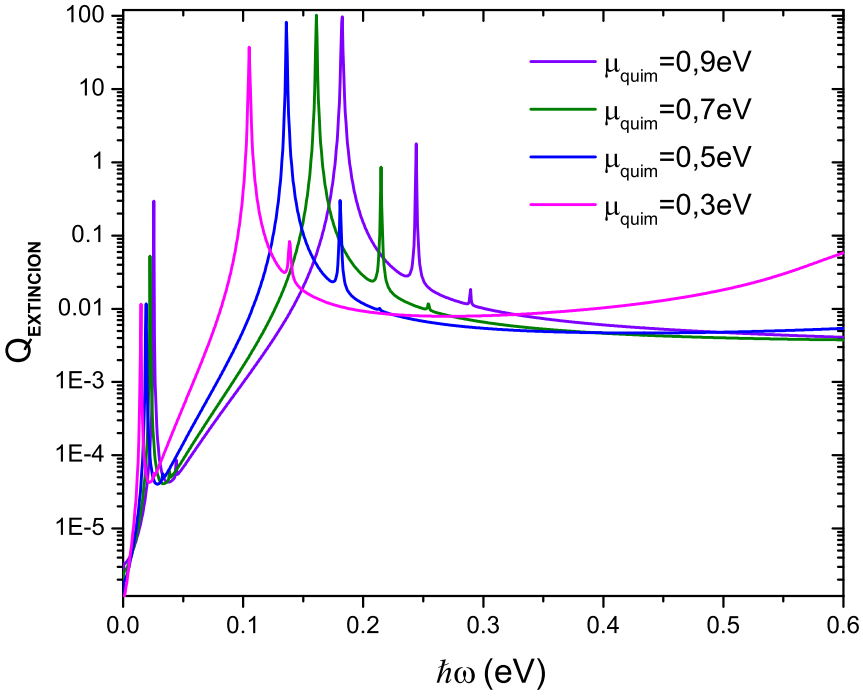

Figura 4.14: Sección eficaz de extinción correspondiente a dos esferas recubiertas de grafeno juntas de radios 195 nm y 200 nm (con permitividades en los medios $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 1$) para diferentes valores de potencial químico (el potencial químico en ambas capas siempre es el mismo).

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo, enmarcado en el estudio de posibles aplicaciones de las estructuras core-shell con grafeno en el rango de los terahertz, estudiamos la excitación de plasmones en estas estructuras. Mientras que en el caso metálico, en el cual las paredes son impenetrables en el mencionado rango de frecuencias, y en el caso dieléctrico, en el cual las propiedades dinámicas las determinan la diferencia de índice entre los medios; en el presente caso las propiedades de los plasmones excitados dependen también de las propiedades constitutivas del grafeno, dadas por su conductividad.

Aplicamos las ecuaciones del electromagnetismo macroscópico y a partir de las condiciones de contorno hallamos de forma rigurosa los coeficientes de transmisión que conectan los campos en las distintas regiones dieléctricas separadas por esferas concéntricas de grafeno; en estos coeficientes aparecen términos que contienen explícitamente la conductividad del mismo. Con estos coeficientes se hallaron expresiones exactas para los campos electromagnéticos en todo punto del espacio en función de la amplitud de la onda incidente.

Hemos obtenido resultados numéricos y como control de los códigos numéricos desarrollados hemos verificado que los resultados reproducen los casos particulares presentes en bibliografía. A partir de allí, hemos ilustrado aspectos dinámicos de los plasmones que se excitan en las dos superficies.

Aunque el formalismo desarrollado en este trabajo permite tratar situaciones con parámetros constitutivos generales para los medios interior, intermedio y exterior a las superficies esféricas de grafeno, hemos considerado unas pocas situaciones ilustrativas concentrándonos

en la interacción entre ambas esferas al variar el radio de las mismas.

Ilustramos con ejemplos la sintonizabilidad de la frecuencia de resonancia a través del potencial químico del grafeno y también el comportamiento de la frecuencia de resonancia plasmónica al variar el radio de las esferas y vimos que se presenta un fenómeno de hibridización al acercarse los radios de las mismas. Hemos mostrado el confinamiento transversal del campo electromagnético asociado a una excitación plasmónica sobre las paredes de una esfera. Se observó la absorción dada en los medios, dependiente de la parte imaginaria de la permitividad eléctrica. También hemos determinado las características polares de los modos plasmónicos $\ell = 1, 2$ y 3 mostrando distribuciones de campo cercano.

Como continuación natural del presente trabajo pueden mencionarse el estudio de la dispersión de ondas electromagnéticas por capas esféricas de grafeno cuya conductividad no sea homogénea o el estudio de la dispersión por capas planas constituidas de pequeñas esferas dieléctricas recubiertas de grafeno. También resulta de interés estudiar la dispersión por esferas constituidas de un número apreciable de capas dieléctricas o metálicas separadas por superficies de grafeno.

Bibliografía

[AM76] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College, Philadelphia, 1976.

[AS65] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, 1965.

[BH98] C. F. Bohren and D. R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley, 1998.

[BYZ15] Y. Yang B. Yang, T. Wu and X. Zhang. Tunable subwavelength strong absorption by graphene wrapped dielectric particles. *Journal of Optics*, 17:035002, 2015.

[CFCW11] B. W. Boudouris J. Horng B. Geng C. Girit A. Zettl M. F. Crommie R. A. Segalman S. G. Louie C. F. Chen, C. H. Park and F. Wang. Controlling inelastic light scattering quantum pathways in graphene. *Nature*, 471:617, 2011.

[dA14] F. J. García de Abajo. Graphene plasmonics: Challenges and opportunities. *ACS Photonics*, 1:135–152, 2014.

[Dep16] R. A. Depine. *Graphene Optics: Electromagnetic Solution of Canonical Problems*. IOP Concise Physics, Morgan Claypool Publishers, 2016.

[Dor10] L. A. Dorado. *Respuesta electromagnética de cristales fotónicos coloidales en la región de bandas altas*. Tesis de doctorado, FCEN, UBA, 2010.

[DSO13] V. Ryzhii D. Svintsov, V. Vyurkov and T. Otsuji. Voltage-controlled surface plasmon-polaritons in double graphene layer structures. *J. App. Phys.*, 113:053701, 2013.

[Fal08] L. A. Falkovsky. Optical properties of graphene and ivvi semiconductors. *Physics-Uspekhi*, 51(9):887, 2008.

[FV06] L. A. Falkovsky and A. A. Varlamov. Space-time dispersion of graphene conductivity. *arXiv:cond-mat/0606800v1*, 2006.

[FWS08] C. Tian C. Girit A. Zettl M. Crommie F. Wang, Y. Zhang and Y. R. Shen. Gate-variable optical transitions in graphene. *Science*, 320:206, 2008.

[HLZ11] Y. Liu H. Liu and D. Zhua. Chemical doping of graphene. *J. Mater. Chem.*, 21:3335, 2011.

[Hun07] J. D. Hunter. Matplotlib: A 2d graphics environment. *Computing In Science & Engineering*, 9(3):90–95, 2007.

[HWKS85] S. C. O'Brien R. F. Curl H. W. Kroto, J. R. Heats and R. E. Smalley. c60: Buckminsterfullerene. *Nature*, 318:162–163, 1985.

[Jac99] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. Wiley, NY, 1999.

[KGN04] A. K. Geim et al K. G. Novoselov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306:666–669, 2004.

[KGN05] A. K. Geim et al K. G. Novoselov. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature*, 438:197–200, 2005.

[Mai07] S. A. Maier. *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. Springer, Berlin, 2007.

[MARD15] M. Cuevas M. A. Riso and R. A. Depine. Tunable plasmonic enhancement of light scattering and absorption in graphene-coated subwavelength wires. *J Quant Spectrosc Radiat*, 17:075001, 2015.

[MCD16] M. A. Riso M. Cuevas and R. A. Depine. Complex frequencies and field distributions of localized surface plasmon modes in graphene-coated subwavelength wires. *J Quant Spectrosc Radiat*, 114:26–33, 2016.

[Mie08] Gustav Mie. Beitrge zur optik trber medien, speziell kolloidaler metallsungen. *Annalen der Physik*, 330 (3):337–445, 1908.

[MJB13] M. Soljačić M. Jablan and H. Buljan. Plasmons in graphene: Fundamental properties and potential applications. *Proc. IEEE*, 101:1689–1704, 2013.

[MJS09] H. Buljan M. Jablan and M. Soljačić. Plasmonics in graphene at infrared frequencies. *Phys. Rev. B*, 80:245435, 2009.

[Rea96] Real Academia de Ciencias de Suecia, 1996.

[Sak05] K. Sakai. *Terahertz Optoelectronics*. Springer, Berlin, 2005.

[SR08] M. A. Schmidt and P. St. J. Russell. Long-range spiralling surface plasmon modes on metallic nanowires. *Optics Express*, 16:13617, 2008.

[ST93] Iijima Sumio and Ichihashi Toshinari. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *Nature*, 363:1603–1605, 1993.

[TCM15] A. Jauho T. Christensen and N. A. Mortensen. Localized plasmons in graphene-coated nanospheres. *Physical review B*, 91(125414), 2015.

[WGX13] Z. Jin J. Shu Q. Zhang R. Vajtai P. M. Ajayan J. Kono W. Gao, G. Shi and Q. Xu. Excitation and active control of propagating surface plasmon polaritons in graphene. *Nano Lett.*, 13:3698–3702, 2013.

[WLK15] R. F. Oulton Wei Liu and Y. S. Kivshar. Geometric interpretations for resonances of plasmonic nanoparticles. *Sci. Rep.*, 5:12148, 2015.

[XFS14] Weitao Zheng Xiaofeng Fan and D J Singh. Light scattering and surface plasmons on small spherical particles. *Light: Science and Applications*, 3(e179), 2014.

[XLN13] W. Lu X. Luo, T. Qiu and Z. Ni. Plasmons in graphene: Recent progress and applications. *Mater. Sci. Eng.*, 74:351, 2013.

[YGJ14a] Bofeng Zhu Huaiqing Liu Yudong Lian Yixiao Gao, Guobin Ren and Shuisheng Jian. Analytical model for plasmon modes in graphene-coated nanowire. *Optics Express*, 22:24322, 2014.

[YGJ14b] Bofeng Zhu Jing Wang Yixiao Gao, Guobin Ren and Shuisheng Jian. Single-mode graphene-coated nanowire plasmonic waveguide. *Optics Letters*, 39:5909, 2014.

[YVBP10] M. I. Vasilevskiy Y. V. Bludov and N. M. R. Peres. Mechanism for graphene-based optoelectronic switches by tuning surface plasmon-polaritons in monolayer graphene. *EPL*, 92:68001, 2010.

[ZQLB08] Z. Jiang Z. Hao M. C. Martin P. Kim H. L. Stormer Z. Q. Li, E. A. Henriksen and D. N. Basov. Dirac charge dynamics in graphene by infrared spectroscopy. *Nature Physics*, 4:532–535, 2008.